Nomenklatura Związków Organicznych

Rekomendacje IUPAC i Nazwy Preferowane 2013

Przygotowała do publikacji Barbara Szechner

©Copyright Narodowy Komitet Międzynarodowej Unii Chemii Czystej i Stosowanej

Tytuł oryginału

Nomenclature of Organic Chemistry. IUPAC
Recommendations and Preferred Names 2013.

Prepared for publication by:
Henri A. Favre, Montreal, Canada and Warren H. Powell, Columbus, OH, USA

ISBN 978-0-85404-182-4

© International Union of Pure and Applied Chemistry

Komisja Terminologii Chemicznej Polskiego Towarzystwa Chemicznego

Przewodniczący: Osman Achmatowicz (2014-)
Wiceprzewodniczący: Rafał Kruszyński (2014-)
Podkomisja Terminologii Chemii Organicznej (2014-):
Osman Achmatowicz, przewodniczący podkomisji TChO
Łukasz Albrecht, Piotr Bałczewski, Tomasz Janecki, Barbara Szechner

TŁUMACZE

Rozdział P-1	Osman Achmatowicz i Barbara Szechner, współpraca Ryszard Bodalski
Rozdział P-2	Osman Achmatowicz i Barbara Szechner, współpraca Ryszard Bodalski
Rozdział P-3	Osman Achmatowicz i Barbara Szechner
Rozdział P-4	Osman Achmatowicz, Barbara Szechner i Selim Achmatowicz
Rozdział P-5	Jacek Młochowski
Rozdział P-6	Łukasz Albrecht , Piotr Bałczewski, Agnieszka Bodzioch, Józef Drabowicz, Tomasz Janecki, Andrzej Jóźwiak, Zbigniew Kamiński, Piotr Kiełbasiński, Rafał Karpowicz, Dorota Krasowska, Jarosław Lewkowski, Adam Pieczonka, Michał Rachwalski, Joanna Skalik
Rozdział P-7	Osman Achmatowicz i Barbara Szechner
Rozdział P-8	Jerzy Suwiński
Rozdział P-9	Tadeusz Mizerski
Rozdział P-10	Anna Chojnacka, Anna Gliszczyńska ,Aleksandra Grudniewska, Marcelina Mazur, Filip Boratyński, Witold Gładkowski, Radosław Gniłka, Grzegorz Kiełbowicz, Czesław Wawrzeńczyk
Załączniki 1-3	Barbara Achmatowicz

Transfer rysunków do wszystkich rozdziałów – Selim Achmatowicz

SKŁAD KOMISJI NOMENKLATURY CHEMII ORGANICZNEJ IUPAC'U (CNOC) (1993-2001)

Członkowie tytularni: J.E.Blackwood (USA 1996-1997); H.J.T.Bos (Holandia), 1987-1995, Wiceprzewodniczący 1991-1995); B.J.Bossenbroek (USA 1998-2001); F.Cozzi (Włochy 1996-2001); H.A.Favre[π] (Kanada 1989-2001, Przewodniczący 1991-2001); P.M.Giles, Jr. (USA 1989-1995); B.J.Herold (Portugalia 1994-1997, Sekretarz 2000-2001); M.V.Kisakürek (Szwajcaria 1994-1997, Wiceprzewodniczący 1996-1997); D.Tavernier (Belgia 1991-1995);J.G.Traynham (USA 1991-1999); J.L.Wiśniewski (Niemcy, 1991-2001); A.Yerin (Rosja 2000-2001).

Członkowie stowarzyszeni: F.Cozzi (Włochy 1994-95); F.Fariňa[π] (Hiszpania 1989-1994); A.A.Formanovsky (Rosja 1998-2001); L.Goebels (Niemcy 2000-2001); H.Hellwich (Niemcy 1998-2001); B.J.Herold (Portugalia 1998-1999); R.J.-R.Hwu (USA + Towarzystwo Chemiczne Taipei 1989-1997); M.A.C.Kaplan (Brazylia 1989-1997); M.V.Kisakürek (Szwajcaria 1998-1999); A.J.Lawson (Niemcy 1991-1999); W.Libscher[π] (Niemcy 1989-1997); M.M.Mikołajczyk (Polska 1989-1997); J.Nyitrai[π] Węgry 1994-2001); H.A.Smith Jr. (USA 1994-2001); J.H.Stocker[π] (USA 1991-1999); D.Tavernier (Belgia 1996-1997); S.S.-C.Tsay (Towarzystwo Chemiczne Taipei 1989-2001); A.Yerin (Rosja 1998-1999).

Przedstawiciele narodowi: O.Achmatowicz (Polska 2000-2001); R.Bicca de Alecastro (Brazylia 1994-1997); S.Chandrasekaran (India 1994-1995); Q.-Y.Chen (Chiny 1991-2001); A.A.Formanovsky (Rosja 1996-1997); E.W.Godly (UK 1994-1997); B.J.Herold (Portugalia 1992-1993); S.Ikegami (Japonia 1986-1999); A.K.Ikizler (Turcja 1987-1997); J.Kachovec (Czechy 1989-2001); P.Kristian (Słowacja 1994-1997); E.Lee (Korea 1994-2001); L.Maat (Holandia 1996-2001); G.P.Moss (UK 1998-2001); L.J.Porter (Nowa Zelandia 1987-1995); J.A.R.Rodrigues (Brazylia 1998-2001); M.S.Wadia (India 1996-2001).

[π] Zmarli

SKŁAD KOMISJI NOMENKLATURY CHEMICZNEJ

I PRZEDSTAWIANIA STRUKTUR IUPAC′U (2002-2013)

Członkowie tytularni: M.A.Beckett (UK 2012 -); J.Brecher (USA 2008-2011); T.Damhus (Dania 2004 -, Sekretarz 2008 -); K.Degtyarenko (UK 2008-2011); M.Dennis (USA 2002-2002); R.Hartshorn (Nowa Zelandia, 2004 -, Wiceprzewodniczący 2008-2009, Przewodniczący 2010-2013); S.Heller (USA 2006-2009); K.-H.Hellwich (Niemcy 2006-2009, 2012 - , Wiceprzewodniczący 2012-2013); M.Hess (Niemcy 2002-2003); P.Hodge (UK 2008-2011); A.T.Hutton (Afryka Południowa 2008-2011); H.D.Kaesz[π] (USA 2002-2005); J.Kachovec (Czechy 2004-2007); G.J.Leigh (UK 2002-2003, 2008-2011); A.D.McNaught (UK 2002-2007, Przewodniczący 2004-2005, były Przewodniczący 2006-2007); G.P.Moss (UK 2002-2011, Wiceprzewodniczący 2004-2005; Przewodniczący 2006-2009, były Przewodniczący 2010-2011); E.Nordlander (Szwecja, 2012 -); J.Nyitrai[π] Węgry 2008-2011); W.H.Powell (USA 2002-2007, 2012-2013, Sekretarz 2002-2007); A.P.Rauter (Portugalia 2012 -); H.Rey (Niemcy 2012 -); W.G.Town (UK 2002-2003); A.Williams (USA 2002-2005, 2012 -); J.Wilson (USA 2008-2011); A.Yerin (Rosja 2004-2007, 2010-2013).

Członkowie stowarzyszeni: J.Brecher (USA 2004-2007); F.Cozzi (Włochy 2006-2007); K.Degtyarenko (Hiszpania 2012 -); S.Heller (USA 2002-2005); K.-H.Hellwich (Niemcy 2010-2011); M.Hess (Niemcy 2004-2005); P.Hodge (UK 2012 -); A.T.Hutton (Afryka Południowa 2006-2007, 2012 -); R.G.Jones (UK 2006-2007); J.Kachovec (Czechy 2008-2011); A.J.Lawson (Niemcy 2002-2005, 2008-2009); G.J.Leigh (UK 2004-2007); E.Nordlander (Szwecja, 2008-2011); B.M.Novak (USA 2002-2003); J.Nyitrai[π] Węgry 2008-2011); W.H.Powell (USA 2008- 2011); J.Reedijk (Holandia 2010-2013); M.J.Toussant (USA 2004-2005); N.Wheatley (UK 2012-2013); J.Wilson (USA 2006-2007, 2012-2013); A.Yerin (Rosja 2008-2009).

Przedstawiciele narodowi: O.Achmatowicz (Polska 2002-2005); V.Ahsen (Turcja 2012 -); I.Anis (Pakistan 2012-2013); F.L.Ansari (Pakistan 2012-2013); S.Baskaran (India 2010-2013); R.Bicca de Alecastro (Brazylia 2010-2011); C.S.Chin (Korea 2004-2005); R. de Barros Faria (Brazylia 2002-2005); Y.Do (Korea 2006-2009); I.L.Dukov (Bułgaria 2006-2009); G.A.Eller (Austria 2012 -); Md.A.Hashem (Bangladesz 2008-2009, 2012-2013); J.He (Chiny 2002-2005), B.J.Herold (Portugalia 2002-2003); R.Hoyos de Rossi (Argentyna 2005-2007); W.Huang (Chiny 2012 -); J.Kachovec (Czechy 2012-2013); S.S.Krishnamurthy (India 2006-2007); L.H.J.Layunen (Finlandia 2008-2009); L.F.Lindoy (Australia 2004-2007); M.A.J.Miah (Bangladesz 2010-2011); L.L.Mkayula (Tanzania 2012-2013); P.Moyna (Urugwaj 2010-2011); J.Nagy (Węgry 2012 -); H.Ogino (Japonia 2008-2011); R.F.Pellón (Kuba 2010-2011); M.Putala (Słowacja 2006-2007); J.M.Ragnar (Szwecja 2004-2007); A.P.Rauter (Portugalia 2010-2011); J.Reedijk (Holandia 2004-2009); P.Righi (Włochy 2004-2007); S.Tantayanon (Tajlandia 2012-2013); J.M.F.Toullec (Francja 2002-2003); Y.Yamamoto (Japonia 2002-2003).

[π] Zmarli

Dedykowane pamięci Henri A. Favre, który niestety zmarł 20 lipca 2013 roku, w czasie kompilacji tej pracy

Spis treści

WSTĘP

PODZIĘKOWANIA

WSTĘP DO WYDANIA POLSKIEGO

ZMIANY WPROWADZONE DO WYDANIA *NOMENKLATURY ZWIĄZKÓW ORGANICZNYCH* Z 2013 ROKU W STOSUNKU DO WYDANIA Z 1979 ROKU, *PRZEWODNIKA* Z 1993 ORAZ OFICJALNYCH PUBLIKACJI IUPAC Z LAT 1993-2002

GLOSARIUSZ

ROZDZIAŁ P-1 OGÓLNE ZASADY, REGUŁY, I KONWENCJE

P-10 WPROWADZENIE

P-11 ZAKRES NOMENKLATURY ZWIĄZKÓW ORGANICZNYCH

P-12 PREFEROWANE, WSTĘPNIE WYBRANE I ZACHOWANE NAZWY IUPAC

P-12.1 PREFEROWANE NAZWY IUPAC
P-12.2 WSTĘPNIE WYBRANE NAZWY
P-12.3 ZACHOWANE NAZWY
P-12.4 METODOLOGIA

P-13 OPERACJE W NOMENKLATURZE ZWIĄZKÓW ORGANICZNYCH

P-13.1 OPERACJA PODSTAWIENIA
P-13.2 OPERACJA ZAMIANY
P-13.3 OPERACJA ADDYCJI
P-13.4 OPERACJA SUBTRAKCJI
P-13.5 OPERACJA ŁĄCZENIA
P-13.6 OPERACJA MULTIPLIKACJI
P-13.7 OPERACJA KONDENSACJI
P-13.8 OPERACJE UŻYWANE TYLKO W NOMENKLATURZE ZWIĄZKÓW NATURALNYCH

P-14 OGÓLNE REGUŁY

P-14.0 WPROWADZENIE
P-14.1 WIĄZALNOŚĆ
P-14.2 PRZEDROSTKI MULTIPLIKACYJNE
P-14.3 LOKANTY
P-14.4 NUMEROWANIE
P-14.5 PORZĄDEK ALFANUMERYCZNY
P-14.6 PORZĄDEK NIE-ALFANUMERYCZNY
P-14.7 WSKAZANY I ‘DODANY WSKAZANY’ ATOM WODORU
P-14.8 ADDUKTY

P-15 RODZAJE NOMENKLATURY

P-15.0 WPROWADZENIE
P-15.1 NOMENKLATURA PODSTAWNIKOWA
P-15.2 NOMENKLATURA KLASOWO-FUNKCYJNA
P-15.3 NOMENKLATURA MULTIPLIKACYJNA
P-15.4 NOMENKLATURA ZAMIENNA (‘a’) SZKIELETU
P-15.5 NOMENKLATURA ZAMIENNA FUNKCJI
P-15.6 NOMENKLATURA ŁĄCZONA

P-16 PISOWNIA NAZWY

P-16.0 WPROWADZENIE
P-16.1 PISOWNIA
P-16.2 ZNAKI PRZESTANKOWE
P-16.3 PRZEDROSTKI ZWIELOKROTNIAJĄCE DI, TRI ETC. VERSUS BIS, TRIS ETC.
P-16.4 INNE OKREŚLENIA LICZBOWE
P-16.5 NAWIASY
P-16.6 KURSYWA
P-16.7 USUWANIE SAMOGŁOSEK
P-16.8 DODAWANIE SAMOGŁOSEK
P-16.9 PRIMOWANIE

ROZDZIAŁ P-2 WODORKI MACIERZYSTE

P-20 WPROWADZENIE

P-21 MONONUKLEARNE I ACYKLICZNE POLINUKLEARNE WODORKI MACIERZYSTE

P-21.1 MONONUKLEARNE WODORKI MACIERZYSTE
P-21.2 ACYKLICZNE POLINUKLEARNE WODORKI MACIERZYSTE

P-22 MONOCYKLICZNE WODORKI MACIERZYSTE

P-22.1 MONOCYKLICZNE WĘGLOWODORY
P-22.2 HETEROMONOCYKLICZNE WODORKI MACIERZYSTE

P-23 POLICYKLICZNE WODORKI MACIERZYSTE (rozszerzony system von Baeyera)

P-23.0 WPROWADZENIE
P-23.1 DEFINICJE I TERMINOLOGIA
P-23.2 NAZYWANIE I NUMEROWANIE WĘGLOWODORÓW von BAEYERA
P-23.3 HETEROGENICZNE HETEROCYKLICZNE MACIERZYSTE WODORKI von BAEYERA
P-23.4 HOMOGENICZNE HETEROCYKLICZNE MACIERZYSTE WODORKI von BAEYERA
P-23.5 HETEROGENICZNE HETEROCYKLICZNE MACIERZYSTE WODORKI VON BAEYERA UTWORZONE Z WYSTĘPUJĄCYCH NA PRZEMIAN HETEROATOMÓW
P-23.6 HETEROCYKLICZNE POLIACYKLICZNE MACIERZYSTE WODORKI ZAWIERAJĄCE HETEROATOMY O NIESTANDARDOWEJ WIĄZALNOŚCI
P-23.7 ZACHOWANE NAZWY MACIERZYSTYCH WODORKÓW von BAEYERA

P-24 SPIRANOWE UKŁADY PIERŚCIENIOWE

P-24-0 WPROWADZENIE
P-24.1 DEFINICJE
P-24.2 SPIRANOWE UKŁADY PIERŚCIENI ZBUDOWANE WYŁĄCZNIE Z MONOCYKLICZNYCH PIERŚCIENI
P-24.3 MONOSPIRANOWE UKŁADY PIERŚCIENI ZAWIERAJĄCE DWA IDENTYCZNE POLICYKLICZNE SKŁADNIKI
P-24.4 MONOSPIRANOWE UKŁADY PIERŚCIENI Z TRZEMA IDENTYCZNYMI POLICYKLICZNYMI UKŁADAMI PIERŚCIENIOWYMI RAZEM SKONDENSOWANYMI SPIRO

P-24.5 MONOSPIRANOWE UKŁADY PIERŚCIENIOWE Z RÓŻNYMI SKŁADNIKAMI, Z KTÓRYCH PRZYNAJMNIEJ JEDEN JEST POLICYKLICZNYM UKŁADEM PIERŚCIENIOWYM
P-24.6 NIEROZGAŁĘZIONE POLISPIRANOWE UKŁADY PIERŚCIENI Z RÓŻNYMI SKŁADNIKAMI, Z KTÓRYCH JEDEN JEST UKŁADEM POLICYKLICZNYM
P-24.7 ROZGAŁĘZIONE POLISPIRANOWE UKŁADY PIERŚCIENI
P-24.8 SPIRANOWE UKŁADY PIERŚCIENI ZAWIERAJĄCE ATOMY O NIESTANDARDOWEJ WIĄZALNOŚCI

P-25 SKONDENSOWANE I MOSTKOWE SKONDENSOWANE UKŁADY PIERŚCIENI

P-25.0 WPROWADZENIE
P-25.1 NAZWY WĘGLOWODOROWYCH MACIERZYSTYCH SKŁADNIKÓW PIERŚCIENI
P-25.2 NAZWY HETEROCYKLICZNYCH MACIERZYSTYCH SKŁADNIKÓW PIERŚCIENI
P-25.3 TWORZENIE NAZW SKONDENSOWANYCH
P-25.4 MOSTKOWE SKONDENSOWANE UKŁADY PIERŚCIENI
P-25. 5 OGRANICZENIA NOMENKLATURY SKONDENSOWANEJ: TRZY KOMPONENTY *ORTO*- I *PERI*-SKONDENSOWANE RAZEM
P-25.6 SKONDENSOWANE UKŁADY PIERŚCIENI Z ATOMAMI SZKIELETU O NIESTANDARDOWYCH WIĄZALNOŚCIACH
P-25.7 PODWÓJNE WIĄZANIA, WSKAZANY ATOM WODORU I δ-KONWENCJA
P-25.8 MACIERZYSTE SKŁADNIKI W MALEJĄCYM PORZĄDKU STARSZEŃSTWA (lista częściowa)

P-26 NOMENKLATURA FANÓW

P-26.0 WPROWADZENIE
P-26.1 POJĘCIA I TERMINOLOGIA
P-26.2 SKŁADNIKI NAZW MACIERZYSTYCH FANÓW
P-26.3 LOKANTY SUPERATOMÓW I LOKANTY PRZYŁĄCZENIA AMPLIFIKANTÓW
P-26.4 NUMEROWANIE MACIERZYSTYCH WODORKÓW FANÓW
P-26.5 NOMENKLATURA ZAMIENNA (‘a’) SZKIELETU W NOMENKLATURZE FANÓW
P-26.6 INNE ASPEKTY NOMENKLATURY FANÓW

P-27 FULLERENY

P-27.0 WPROWADZENIE
P-27.1 DEFINICJE
P-27.2 NAZWY FULLERENÓW
P-27.3 NUMEROWANIE FULLERENÓW
P-27.4 FULLERENY MODYFIKOWANE STRUKTURALNIE
P-27.5 ZAMIANA ATOMÓW SZKIELETU
P-27.6 ADDYCJA PIERŚCIENI I ZESPOŁÓW PIERŚCIENI DO FULLERENÓW
P-27.7 INNE ASPEKTY NOMENKLATURY FULLERENÓW

P-28 ZESPOŁY PIERŚCIENI

P-28.0 WPROWADZENIE
P-28.1 DEFINICJE
P-28.2 ZESPOŁY PIERŚCIENI ZŁOŻONE Z DWÓCH IDENTYCZNYCH UKŁADÓW CYKLICZNYCH
P-28.3 NIEROZGAŁĘZIONE ZESPOŁY PIERŚCIENI ZŁOŻONE Z TRZECH DO SZEŚCIU IDENTYCZNYCH UKŁADÓW CYKLICZNYCH
P-28.4 ZESPOŁY PIERŚCIENI UTWORZONE Z IDENTYCZNYCH UKŁADÓW CYKLICZNYCH MODYFIKOWANYCH NOMENKLATURĄ ZAMIENNĄ (‘a’) SZKIELETU
P-28.5 ZESPOŁY PIERŚCIENI UTWORZONE Z WIĘCEJ NIŻ SZEŚCIU IDENTYCZNYCH UKŁADÓW CYKLICZNYCH
P-28.6 ROZGAŁĘZIONE ZESPOŁY PIERŚCIENI IDENTYCZNYCH UKŁADÓW CYKLICZNYCH
P-28.7 ZESPOŁY PIERŚCIENI NIEIDENTYCZNYCH UKŁADÓW CYKLICZNYCH

P-29 PRZEDROSTKI WSKAZUJĄCE PODSTAWNIKI WYWODZĄCE SIĘ Z WODORKÓW MACIERZYSTYCH

P-29.0 WPROWADZENIE
P-29.1 DEFINICJE
P-29.2 OGÓLNA METODOLOGIA NAZYWANIA PRZEDROSTKÓW PODSTAWNIKOWYCH
P-29.3 SYSTEMATYCZNE PRZEDROSTKI DLA PROSTYCH PODSTAWNIKÓW WYWODZĄCE SIĘ Z NASYCONYCH WODORKÓW MACIERZYSTYCH
P-29.4 PODSTAWNIKI ZESPOLONE
P-29.5 PODSTAWNIKI KOMPLEKSOWE
P-29.6 ZACHOWANE NAZWY PRZEDROSTKÓW PROSTYCH PODSTAWNIKÓW WYWODZĄCYCH SIĘ Z WODORKÓW MACIERZYSTYCH OPISANYCH W ROZDZIALE P-2

ROZDZIAŁ P-3 GRUPY CHARAKTERYSTYCZNE (FUNKCYJNE) I PODSTAWNIKI

P-30 WPROWADZENIE

P-31 MODYFIKACJA STOPNIA UWODORNIENIA MACIERZYSTEGO WODORKU

P-31.0 WPROWADZENIE
P-31.1 KOŃCÓWKI ‘EN’ LUB ‘YN’
P-31.2 PRZEDROSTKI ‘HYDRO’ I ‘DEHYDRO’

P-32 PRZEDROSTKI DLA PODSTAWNIKÓW WYWODZĄCYCH SIĘ Z MACIERZYSTYCH WODORKÓW O ZMODYFIKOWANYM STOPNIU HYDROGENACJI

P-32.0 WPROWADZENIE
P-32.1 PODSTAWNIKI WYWODZĄCE SIĘ Z MACIERZYSTYCH WODORKÓW O NAZWACH Z KOŃCÓWKAMI ‘EN’ ALBO ‘YN’
P-32.2 PODSTAWNIKI WYWODZĄCE SIĘ Z MACIERZYSTYCH WODORKÓW O NAZWACH ZMODYFIKOWANYCH PRZEDROSTKIEM ‘HYDRO’
P-32.3 ZACHOWANE NAZWY PODSTAWNIKÓW WYWODZĄCYCH SIĘ Z NIENASYCONYCH ACYKLICZNYCH WODORKÓW MACIERZYSTYCH
P-32.4 ZACHOWANE NAZWY PODSTAWNIKÓW WYWODZACYCH SIĘ Z CZĘŚCIOWO NASYCONYCH POLICYKLICZNYCH WODORKÓW MACIERZYSTYCH

P-33 PRZYROSTKI

P-33.0 WPROWADZENIE
P-33.1 DEFINICJE
P-33.2 PRZYROSTKI FUNKCYJNE
P-33.3 PRZYROSTKI SKUMULOWANE

P-34 FUNKCYJNE ZWIĄZKI MACIERZYSTE

P-34.0 WPROWADZENIE
P-34.1 ZACHOWANE ZWIĄZKI O MACIERZYSTYCH FUNKCJACH
P-34.2 PODSTAWNIKI UTWORZONE ZE ZWIĄZKÓW O MACIERZYSTYCH FUNKCJACH

P-35 PRZEDROSTKI ODPOWIADAJĄCE GRUPOM CHARAKTERYSTYCZNYM

P-35.0 WPROWADZENIE
P-35.1 OGÓLNA METODOLOGIA
P-35.2 PROSTE PRZEDROSTKI WSKAZUJĄCE GRUPY CHARAKTERYSTYCZNE
P-35.3 ZESPOLONE PRZEDROSTKI PODSTAWNIKOWE
P-35.4 KOMPLEKSOWE PRZEDROSTKI PODSTAWNIKOWE
P-35.5 MIESZANE PRZEDROSTKI PODSTAWNIKOWE

ROZDZIAŁ P-4 REGUŁY TWORZENIA NAZWY

P-40 WPROWADZENIE

P-41 PORZĄDEK STARSZEŃSTWA KLAS

P-42 PORZĄDEK STARSZEŃSTWA KWASÓW

P-42.1 KLASA 7A. NAZWY KWASÓW WYRAŻANE PRZEZ PRZYROSTKI (Z WYŁĄCZENIEM KWASÓW KARBONOWEGO I POLIKARBONOWYCH)
P-42.2 KLASA 7B. KWASY WĘGLOWE BEZ PODSTAWIALNYCH ATOMÓW WODORU
P-42.3 KLASA 7C. KWASY NIEWĘGLOWE MAJĄCE NA ATOMIE CENTRALNYM PODSTAWIALNE ATOMY WODORU
P-42.4 KLASA 7D. KWASY NIEWĘGLOWE UŻYTE DO GENEROWANIA POCHODNYCH O PODSTAWIALNYCH ATOMACH WODORU
P-42.5 KLASA 7E. INNE JEDNOZASADOWE 'OKSO' KWASY UŻYWANE JAKO FUNKCYJNE ZWIĄZKI MACIERZYSTE

P-43 PORZĄDEK STARSZEŃSTWA PRZYROSTKÓW

P-43.0 WPROWADZENIE
P-43.1 OGÓLNA METODOLOGIA ZAMIANY FUNKCJI

P-44 PORZĄDEK STARSZEŃSTWA STRUKTUR MACIERZYSTYCH

P-44.0 WPROWADZENIE
P-44.1 PORZĄDEK STARSZEŃSTWA STRUKTUR MACIERZYSTYCH
P-44.2 PORZĄDEK STARSZEŃSTWA WYŁĄCZNIE PIERŚCIENI I UKŁADÓW PIERŚCIENIOWYCH
P-44.3 STARSZEŃSTWO ŁAŃCUCHÓW ACYKLICZNYCH (łańcuch główny)
P-44.4 KRYTERIA STARSZEŃSTWA STOSUJĄCE SIĘ DO PIERŚCIENI, UKŁADÓW PIERŚCIENIOWYCH LUB ŁAŃCUCHOWYCH

P-45 WYBÓR PREFEROWANEJ NAZWY IUPAC

P-45.0 WPROWADZENIE
P-45.1 MULTIPLIKOWANIE STRUKTUR MACIERZYSTYCH O IDENTYCZNYM STARSZEŃSTWIE
P-45.2 KRYTERIA ZWIĄZANE Z LICZBĄ I POZYCJĄ PODSTAWNIKÓW
P-45.3 KRYTERIA ZWIĄZANE TYLKO Z PODSTAWNIKAMI O NIESTANDARDOWEJ WIĄZALNOŚCI, PRZY RÓWNOŚCI INNYCH KRYTERIÓW
P-45.4 KRYTERIA ZWIĄZANE WYŁĄCZNIE Z MODYFIKACJĄ IZOTOPOWĄ PRZY RÓWNOWAŻNOŚCI INNYCH KRYTERIÓW
P-45.5 KRYTERIA ZWIĄZANE Z ALFANUMERYCZNYM PORZĄDKIEM NAZW
P-45.6 KRYTERIA ZWIĄZANE Z KONFIGURACJĄ

P-46 ŁAŃCUCH GŁÓWNY W PODSTAWNIKACH

P-46.0 WPROWADZENIE
P-46.1 GŁÓWNY ŁAŃCUCH PODSTAWNIKA
P-46.2 GŁÓWNE ŁAŃCUCHY PODSTAWNIKÓW W ZWIĄZKACH ZNACZONYCH IZOTOPOWO
P-46.3 GŁÓWNE ŁAŃCUCHY PODSTAWNIKÓW W ZWIĄZKACH Z CENTRAMI STEREOGENICZNYMI

ROZDZIAŁ P-5 WYBÓR PREFEROWANYCH NAZW IUPAC I TWORZENIE NAZW ZWIĄZKÓW ORGANICZNYCH

P-50 WPROWADZENIE

P-51 WYBÓR PREFEROWANEGO RODZAJU NOMENKLATURY IUPAC

P-51.0 WPROWADZENIE
P-51.1 WYBÓR PREFEROWANEGO RODZAJU NOMENKLATURY
P-51.2 NOMENKLATURA KLASOWO-FUNKCYJNA
P-51.3 NOMENKLATURA MULTIPLIKACYJNA
P-51.4 NOMENKLATURA ZAMIENNA ('a') SZKIELETU

P-51.5 NOMENKLATURA ŁĄCZONA *vs.* NOMENKLATURA PODSTAWNIKOWA

P-52 WYBÓR PREFEROWANYCH NAZW IUPAC I WSTĘPNIE WYBRANYCH NAZW MACIERZYSTYCH WODORKÓW

P-52.1 WYBÓR WSTĘPNIE WYBRANYCH NAZW
P-52.2 WYBÓR PREFEROWANYCH NAZW IUPAC

P-53 WYBÓR PREFEROWANYCH ZACHOWANYCH NAZW MACIERZYSTYCH WODORKÓW

P-54 WYBÓR PREFEROWANEJ METODY MODYFIKOWANIA STOPNIA HYDROGENACJI

P-54.1 METODY MODYFIKOWANIA STOPNIA HYDROGENACJI MACIERZYSTYCH WODORKÓW
P-54.2 NIENASYCONE ZWIĄZKI MONOKARBOCYKLICZNE
P-54.3 NIENASYCENIE W ZESPOŁACH PIERŚCIENI SKŁADAJĄCYCH SIĘ Z MONOCYKLICZNYCH PIERŚCIENI 'MANCUDE' I NASYCONYCH
P-54.4 NAZWY MODYFIKOWANE PRZEDROSTKAMI 'HYDRO' LUB 'DEHYDRO'

P-55 WYBÓR PREFEROWANYCH ZACHOWANYCH NAZW ZWIĄZKÓW O MACIERZYSTYCHFUNKCJACH

P-56 WYBÓR PREFEROWANEGO PRZYROSTKA DLA GŁÓWNEJ GRUPY CHARAKTERYSTYCZNEJ

P-56.1 PRZYROSTEK 'PEROKSOL' DLA –OOH
P-56.2 PRZYROSTKI '*SO*-TIOPEROKSOL', I ICH ANALOGI CHALKOGENOWE
P-56.3 PRZYROSTKI 'IMIDOAMID' I 'KARBOKSYIMIDOAMID'
P-56.4 KOŃCÓWKI 'DIYL' I 'YLIDEN' *vs.*'YLEN'

P-57 WYBÓR PREFEROWANYCH I WSTĘPNIE WYBRANYCH PRZEDROSTKÓW PODSTAWNIKÓW

P-57.1 PRZEDROSTKI PODSTAWNIKÓW WYWODZĄCE SIĘ Z MACIERZYSTYCH WODORKÓW
P-57.2 PRZEDROSTKI WYWODZĄCE SIĘ Z GRUP CHARAKTERYSTYCZNYCH (FUNKCYJNYCH)
P-57.3 PRZEDROSTKI WYWODZĄCE SIĘ Z ORGANICZNYCH ZWIĄZKÓW O MACIERZYSTYCH FUNKCJACH
P-57.4 TWORZENIE LINIOWYCH ZESPOLONYCH I /LUB KOMPLEKSOWYCH PRZEDROSTKÓW PODSTAWNIKOWYCH

P-58 WYBÓR PREFEROWANYCH NAZW IUPAC

P-58.1 WPROWADZENIE
P-58.2 WSKAZANY ATOM WODORU, 'DODANY WSKAZANY ATOM WODORU' I NIEROZŁĄCZNE PRZEDROSTKI HYDRO
P-58.3 HOMOGENICZNE ŁAŃCUCHY HETERO I GRUPY FUNKCYJNE

P-59 TWORZENIE NAZWY

P-59.0 WPROWADZENIE
P-59.1 OGÓLNA METODOLOGIA
P-59.2 PRZYKŁADY ILUSTRUJĄCE METODOLOGIĘ

ROZDZIAŁ P-6 ZASTOSOWANIE DO OKREŚLONYCH KLAS ZWIĄZKÓW

P-60 WSTĘP

P-60.1 ZARYS TEMATYCZNY
P-60.2 PRZEDSTAWIENIE NAZW

P-61 NOMENKLATURA PODSTAWNIKOWA: TRYB PREFIKSOWY

P-61.0 WPROWADZENIE
P-61.1 OGÓLNA METODOLOGIA
P-61 2 GRUPY HYDROKARBYLOWE I ODPOWIEDNIE GRUPY DI- I POLIWALENCYJNE
P-61.3 ZWIĄZKI HALOGENOWE
P-61.4 ZWIĄZKI DIAZO
P-61.5 ZWIĄZKI NITRO I NITROZO
P-61.6 HETERONY
P-61.7 AZYDKI
P-61.8 IZOCYJANIANY
P-61.9 IZOCYJANKI
P-61.10 PIORUNIANY (FULMINIANY) I IZOPIORUNIANY (IZOFULMINIANY)
P-61.11 ZWIĄZKI POLIFUNKCYJNE

P-62 AMINY I IMINY

P-62.0 WPROWADZENIE
P-62.1 OGÓLNA METODOLOGIA
P-62.2 AMINY
P-62.3 IMINY
P-62.4 *N*-PODSTAWIENIE AMIN I IMIN PRZEZ HETEROATOMY
P-62.5 TLENKI AMIN, TLENKI IMIN, I ANALOGI CHALKOGENOWE

P-63 ZWIĄZKI HYDROKSYLOWE, ETERY, WODORONADTLENKI, NADTLENKI, I ANALOGI CHALKOGENOWE

P-63.0 WPROWADZENIE
P-63.1 ZWIĄZKI HYDROKSYLOWE I ANALOGI CHALKOGENOWE
P-63.2 ETERY I ANALOGI CHALKOGENOWE
P-63.3 NADTLENKI I ANALOGI CHALKOGENOWE
P-63.4 HYDRONADTLENKI (PEROKSOLE) I CHALKOGENOWE ANALOGI**
P-63.5 CYKLICZNE ETERY, SULFIDY, SELENIDY, I TELLURYDY
P-63.6 SULFOTLENKI I SULFONY
P-63.7 ZWIĄZKI POLIFUNKCYJNE
P-63.8 SOLE ZWIĄZKÓW HYDROKSYLOWYCH , ZWIĄZKÓW HYDROPEROKSY I ICH ANALOGÓW CHALKOGENOWYCH

P-64 KETONY, PSEUDOKETONY, HETERONY, I ANALOGI CHALKOGENOWE

P-64.0 WPROWADZENIE
P-64.1 DEFINICJE
P-64.2 KETONY
P-64.3 PSEUDOKETONY
P-64.4 HETERONY
P-64.5 GRUPY KARBONYLOWE JAKO PRZEDROSTKI
P-64.6 ANALOGI CHALKOGENOWE KETONÓW, PSEUDOKETONÓW, I HETERONÓW
P-64.7 POLIFUNKCYJNE KETONY, PSEUDOKETONY, I HETERONY
P-64.8 ACYLOINY

P-65 KWASY, HALOGENKI I PEUDOHALOGENKI ACYLOWE, SOLE, ESTRY, I ANHYDRYDY

P-65.0 WPROWADZENIE
P-65.1 KWASY KARBOKSYLOWE I ANALOGI Z ZAMIANĄ FUNKCJI
P-65.2 KWASY WĘGLOWY, CYJANOWY ORAZ DI- I POLIWĘGLOWY
P-65.3 KWASY SULFONOWE I ANALOGI Z ZAMIANĄ FUNKCJI

P-65.4 GRUPY ACYLOWE I GRUPY PODSTAWNIKOWE
P-65.5 HALOGENKI I PSEUDOHALOGENKI KWASOWE
P-65.6 SOLE I ESTRY
P-65.7 BEZWODNIKI I ICH ANALOGI

P-66 AMIDY, IMIDY, HYDRAZYDY,NITRYLE, ALDEHYDY, ICH ANALOGI CHALKOGENOWE I POCHODNE

P-66.0 WPROWADZENIE
P-66.1 AMIDY
P-66.2 IMIDY
P-66.3 HYDRAZYDY
P-66.4 AMIDYNY, AMIDRAZONY, HYDRAZYDYNY, I AMIDOOKSYMY (OKSYMY AMIDU)
P-66.5 NITRYLE
P-66.6 ALDEHYDY

P-67 MONONUKLEARNE I POLINUKLEARNE KWASY NIEWĘGLOWE ORAZ ICH ANALOGI Z ZAMIANĄ FUNKCJI

P-67.0 WPROWADZENIE
P-67.1 MONONUKLEARNE NIEWĘGLOWE OKSOKWASY
P-67.2 DI- I POLINUKLEARNE NIEWĘGLOWE OKSOKWASY
P-67.3 NAZWY PODSTAWNIKOWE I NAZWY KLAS FUNKCYJNYCH POLIKWASÓW

P-68 NOMENKLATURA ZWIĄZKÓW ORGANICZNYCH PIERWIASTKÓW GRUP 13, 14, 15, 16, I 17 POMINIĘTA W PODROZDZIAŁACH OD P-62 DO P-67

P-68.0 WPROWADZENIE
P-68.1 NOMENKLATURA ZWIĄZKÓW PIERWIASTKÓW GRUPY 13
P-68.2 NOMENKLATURA ZWIĄZKÓW PIERWIASTKÓW GRUPY 14
P-68.3 NOMENKLATURA ZWIĄZKÓW PIERWIASTKÓW GRUPY 15
P-68.4 NOMENKLATURA ZWIĄZKÓW PIERWIASTKÓW GRUPY 16
P-68.5 NOMENKLATURA ZWIĄZKÓW PIERWIASTKÓW GRUPY 17

P-69 NOMENKLATURA ZWIĄZKÓW METALOORGANICZNYCH

P-69.0 WPROWADZENIE
P-69.1 ZWIĄZKI METALOORGANICZNE PIERWIASTKÓW Z GRUP 13, 14, 15, I 16
P-69.2 ZWIĄZKI METALOORGANICZNE PIERWIASTKÓW Z GRUP OD 3 DO 12
P-69.3 ZWIĄZKI METALOORGANICZNE PIERWIASTKÓW Z GRUP 1 I 2
P-69.4 METALACYKLE
P-69.5 KOLEJNOŚĆ PORZĄDKU STARSZEŃSTWA DLA ZWIĄZKÓW METALOORGANICZNYCH

ROZDZIAŁ P-7 RODNIKI, JONY, I POKREWNE RODZAJE

P-70 WPROWADZENIE

P-70.1 OGÓLNA METODOLOGIA
P-70.2 STARSZEŃSTWO RODNIKÓW I JONÓW
P-70.3 TWORZENIE NAZWY
P-70.4 OGÓLNE REGUŁY WYBORU PREFEROWANYCH NAZW

P-71 RODNIKI

P-71.1 OGÓLNA METODOLOGIA
P-71.2 RODNIKI POCHODZĄCE Z MACIERZYSTYCH WODORKÓW
P-71.3 CENTRA RODNIKOWE W GRUPACH CHARAKTERYSTYCZNYCH
P-71.4 ZESPOŁY MACIERZYSTYCH RODNIKÓW

P-71.5 PRZEDROSTKI WSKAZUJĄCE RODNIKI
P-71.6 PORZĄDEK WYMIENIANIA I STARSZEŃSTWA PRZYROSTKÓW ‘YL’, ‘YLIDEN’, I ‘YLIDYN’
P-71.7 WYBÓR MACIERZYSTEGO RODNIKA

P-72 ANIONY

P-72.1 OGÓLNA METODOLOGIA
P-72.2 ANIONY UTWORZONE PRZEZ ODERWANIE HYDRONÓW
P-72.3 ANIONY UTWORZONE PRZEZ ADDYCJĘ JONÓW WODORKOWYCH
P-72.4 NOMENKLATURA ZAMIENNA (‘a’) SZKIELETU
P-72.5 WIELOKROTNE CENTRA ANIONOWE
P-72.6 CENTRA ANIONOWE WSPÓŁISTNIEJĄCE W ZWIĄZKACH MACIERZYSTYCH I PODSTAWNIKACH
P-72.7 WYBÓR MACIERZYSTEJ STRUKTURY ANIONOWEJ
P-72.8 PRZYROSTKI ‘ID’ I ‘UID’ I λ-KONWENCJA

P-73 KATIONY

P-73.0 WPROWADZENIE
P-73.1 ZWIĄZKI KATIONOWE Z CENTRAMI KATIONOWYMI UTWORZONYMI FORMALNIE PRZEZ ADDYCJĘ HYDRONÓW
P-73.2 ZWIĄZKI KATIONOWE Z CENTRAMI KATIONOWYMI UTWORZONYMI PRZEZ FORMALNE ODERWANIE JONÓW WODORKOWYCH
P-73.3 λ-KONWENCJA Z PRZYROSTKIEM ‘YLIUM’
P-73.4 NOMENKLATURA ZAMIENNA (‘a’) SZKIELETU DLA KATIONÓW
P-73.5 ZWIĄZKI KATIONOWE Z WIELOKROTNYMI CENTRAMI KATIONOWYMI
P-73.6 NAZWY PRZEDROSTKÓW KATIONOWYCH
P-73.7 WYBÓR MACIERZYSTEJ STRUKTURY
P-73.8 PRZYROSTKI ‘IUM’ *vs* ‘YLIUM’ I λ-KONWENCJA

P-74 ZWITTERJONY

P-74.0 WPROWADZENIE
P-74.1 ZWITTERJONOWE STRUKTURY MACIERZYSTE O ANIONOWYCH I KATIONOWYCH CENTRACH W TYM SAMYM ZWIĄZKU MACIERZYSTYM WŁĄCZAJĄC JONOWE CENTRA W GRUPACH CHARAKTERYSTYCZNYCH WSKAZYWANYCH PRZYROSTKAMI
P-74.2 ZWIĄZKI DIPOLARNE

P-75 RODNIKI JONÓW

P-75.1 RODNIKI JONÓW UTWORZONE PRZEZ ADDYCJĘ LUB USUNIĘCIE ELEKTRONÓW
P-75.2 RODNIKI JONÓW POCHODZĄCE Z MACIERZYSTYCH WODORKÓW
P-75.3 RODNIKO-JONY W GRUPACH CHARAKTERYSTYCZNYCH
P-75.4 JONOWE I RODNIKOWE CENTRA W RÓŻNYCH MACIERZYSTYCH STRUKTURACH

P-76 ZDELOKALIZOWANE RODNIKI I JONY

P-76.1 DELOKALIZACJA W NAZWIE, DOTYCZĄCEJ JEDNEGO CENTRUM RODNIKOWEGO ALBO JONOWEGO W STRUKTURZE OBECNYCH PONADTO SPRZĘŻONYCH WIĄZANIACH PODWÓJNYCH, JEST WYRAŻANA PRZEZ ODPOWIEDNI PRZYROSTEK BEZ LOKANTÓW

P-77 SOLE

P-77.1 PREFEROWANE NAZWY DLA SOLI ZASAD ORGANICZNYCH
P-77.2 SOLE UTWORZONE Z ALKOHOLI (WŁĄCZJĄC FENOLE), PEROKSOLI I ICH CHALKOGENOWYCH ANALOGÓW
P-77.3 SOLE UTWORZONE Z KWASÓW ORGANICZNYCH

ROZDZIAŁ P-8 ZWIĄZKI MODYFIKOWANE IZOTOPOWO

P-80 WPROWADZENIE

P-81 SYMBOLE I DEFINICJE

P-81.1 SYMBOLE NUKLIDÓW
P-81.2 SYMBOLE ATOMÓW
P-81.3 NAZWY ATOMÓW I JONÓW WODORU
P-81.4 ZWIĄZKI IZOTOPOWO NIEMODYFIKOWANE
P.81.5 ZWIĄZKI IZOTOPOWO MODYFIKOWANE

P-82 ZWIĄZKI IZOTOPOWO PODSTAWIONE

P-82.0 WPROWADZENIE
P-82.1 STRUKTURY
P-82.2 NAZWY
P-82.3 PORZĄDEK SYMBOLI NUKLIDÓW
P-82.4 ZWIĄZKI STEREOIZOMERYCZNE IZOTOPOWO PODSTAWIONE
P-82.5 NUMEROWANIE
P-82.6 LOKANTY

P-83 ZWIĄZKI IZOTOPOWO ZNACZONE

P-83.1 ZWIĄZKI SPECYFICZNIE ZNACZONE
P-83.2 ZWIĄZKI SELEKTYWNIE ZNACZONE
P-83.3 ZWIĄZKI NIESELEKTYWNIE ZNACZONE
P-83.4 ZWIĄZKI IZOTOPOWO ZUBOŻONE
P-83.5 ZNAKOWANIE OGÓLNE I JEDNOLITE

P-84 PRZYKŁADY PORÓWNAWCZE WZORÓW I NAZW ZWIĄZKÓW IZOTOPOWO MODYFIKOWANYCH

ROZDZIAŁ P-9 OKREŚLANIE KONFIGURACJI I KONFORMACJI

P-90 WPROWADZENIE

P-91 GRAFICZNE PRZEDSTAWIANIE I NAZYWANIE STEREOIZOMERÓW

P-91.1 GRAFICZNE PRZEDSTAWIANIE STREOIZOMERÓW
P-91.2 STEREODESKRYPTORY
P-91.3 NAZYWANIE STEREOIZOMERÓW

P-92 PRIORYTET CIP I REGUŁY SEKWENCJI

P-92.1 SYSTEM CAHNA – INGOLDA – PRELOGA (CIP): OGÓLNA METODOLOGIA
P-92.2 REGUŁA SEKWENCJI (1)
P-92.3 REGUŁA SEKWENCJI (2)
P-92.4 REGUŁA SEKWENCJI (3)
P-92.5 REGUŁA SEKWENCJI (4)
P-92.6 REGUŁA SEKWENCJI (5)

P-93 OKREŚLANIE KONFIGURACJI

P-93.0 WPROWADZENIE
P-93.1 OGÓLNE ASPEKTY OKREŚLANIA KONFIGURACJ
P-93.2 TETRAEDRYCZNA KONFIGURACJA ATOMÓW INNYCH NIŻ ATOM WĘGLA
P-93.3 KOFIGURACJA NIETETRAEDRYCZNA
P-93.4 OKREŚLANIE KONFIGURACJI ACYKLICZNYCH ZWIĄZKÓW ORGANICZNYCH
P-93.5 OKREŚLANIE KONFIGURACJI CYKLICZNYCH ZWIĄZKÓW ORGANICZNYCH

P-93.6 ZWIĄZKI SKŁADAJĄCE SIĘ Z PIERŚCIENI I ŁAŃCUCHÓW

P-94 KONFORMACJA I STEREODESKRYPTORY KONFORMACYJNE

P-94.1 DEFINICJA
P-94.2 KĄTY TORSYJNE
P-94.3 OKREŚLONE STEREODESKRYPTORY

ROZDZIAŁ P-10 STRUKTURY MACIERZYSTE PRODUKTÓW NATURALNYCH I ZWIĄZKÓW POKREWNYCH

P-100 WPROWADZENIE

P-101 NOMENKLATURA PRODUKTÓW NATURALNYCH OPARTA NA NAZWACH MACIERZYSTYCH WODORKÓW (ALKALOIDY, STEROIDY,TERPENY, KAROTENY, KORYNOIDY, TETRAPIROLE, I ZWIĄZKI PODOBNE)

P-101.1 BIOLOGICZNIE UZASADNIONE NAZWY ZWYCZAJOWE
P-101.2 SEMISYSTEMATYCZNA NOMENKLATURA DLA PRODUKTÓW NATURALNYCH (stereomacierzyste wodorki)
P-101.3 MODYFIKACJA SZKIELETU STRUKTUR MACIERZYSTYCH
P-101.4 ZAMIANA ATOMÓW SZKIELETU
P-101.5 ADDYCJA PIERŚCIENI I UKŁADÓW PIERŚCIENIOWYCH
P-101.6 MODYFIKACJA STOPNIA UWODORNIENIA STRUKTUR MACIERZYSTYCH
P-101.7 POCHODNE STRUKTUR MACIERZYSTYCH
P-101.8 DODATKOWE ASPEKTY OKREŚLANIA KONFIGURACJI

P-102 NOMENKLATURA WĘGLOWODANÓW

P-102.1 DEFINICJE
P-102.2 MACIERZYSTE MONOSACHARYDY
P-102.3 SYMBOLIKA KONFIGURACYJNA
P-102.4 WYBÓR MACIERZYSTEJ STRUKTURY
P-102.5 MONOSACHARYDY: ALDOZY I KETOZY, DEOKSY I AMINO CUKRY
P-102.6 DISACHARYDY I OLIGOSACHARYDY

P-103 AMINOKWASY I PEPTYDY

P-103.0 WPROWADZENIE
P-103.1 NAZWY, NUMEROWANIE I OKREŚLANIE KONFIGURACJI AMINOKWASÓW
P-103.2 POCHODNE AMINOKWASÓW
P-103.3 NOMENKLATURA PEPTYDÓW

P-104 CYKLITOLE

P-104.0 WPROWADZENIE
P-104.1 DEFINICJE
P-104.2 TWORZENIE NAZWY
P-104.3 POCHODNE CYKLITOLI

P-105 NUKLEOZYDY

P-105.0 WPROWADZENIE
P-105.1 ZACHOWANE NAZWY NUKLEOZYDÓW
P-105.2 PODSTAWIENIE NUKLEOZYDÓW

P-106 NUKLEOTYDY

P-106.0 WSTĘP
P-106.1 NAZWY ZACHOWANE

P-106.2 DIFOSFORANY I TRIFOSFORANY NUKLEOTYDÓW
P-106.3 POCHODNE NUKLEOTYDÓW

P-107 LIPIDY

P-107.0 WPROWADZENIE
P-107.1 DEFINICJE
P-197.2 GLICERYDY
P-107.3 KWASY FOSFATYDOWE
P-107.4 GLIKOLIPIDY

LITERATURA CYTOWANA

1. *IUPAC Nomenclature of Organic Chemistry, Sections A, B, C, D , E, F and H, 1979 Edition,* Pergamon Press, 1979
Nomenklatura Związków Organicznych, PTCh, 1992;
(a) *Część A – Węglowodory, Część B – Podstawowe układy heterocykliczne,* PWN, 1978;
(b) *Część C – Związki z grupami zawierającymi poza węglem, wodorem, tlenem, azotem, fluorowcami, siarką, selenem i tellurem również inne pierwiastki* PWN, 1979;
(c) *Część D – Związki organiczne zawierające poza węglem, wodorem, tlenem, azotem, fluorowcami, siarką, selenem i tellurem również inne pierwiastki,* PWN, 1981;
(d) *Część E – Stereochemia, PWN, 1979;*
(e) *Nomenklatura związków organicznych. Część F – Produkty naturalne i związki pokrewne, Wiad.Chem.,* 1979, **33**, 44-58;
(f) *Nomenklatura związków organicznych. Część H – Związki o modyfikowanym składzie izotopowym, Wiad.Chem.*, 1979, **33**, 698-702, 753-765;
2. *A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds, Recommendations 1993,* Blackwell Scientific Publications, 1993;
Przewodnik do nomenklatury związków organicznych, PTCh, 1974;
3. Revised Nomenclature for Radicals and Ions, Radicals Ions and Related Species (*IUPAC Recommendations 1993, Pure Appl.Chem.*, **70**, 1513-1545 (1998);
Skorygowana nomenklatura rodników, jonów, jonorodników i podobnych indywiduów chemicznych, *Wiad.Chem., Biblioteka*, 2001;
4. Nomenclature for Fused and Bridged-fused Ring Systems (IUPAC Recommendations 1998) *Pure Appl.Chem.*, **70**, 143-216 (1998);
5. Phane Nomenclature Part I. Phane Parent Names (IUPAC Recommendations 1998) *Pure Appl.Chem.*, **70**, 1513-1545 (1998);
6. Phane Nomenclature Part II Modification of the Degree of Hydrogenation and Substitution Derivatives of Phane Parent Hydrides (IUPAC Recommendations 2002) *Pure Appl.Chem.*, **74**, 809-834 (1998);
7. Extension and Revision of the von Baeyer System for Naming Polycyclic Compounds (including bicyclic compounds) (IUPAC Recommendations 1999) *Pure Appl.Chem.*, **71**, 513-529 (1999);
8. Extension and Revision of the Nomenclature for Spiro Compounds (IUPAC Recommendations 1999) *Pure Appl.Chem.*, **71**, 531-558 (1999);
9. Revised Section F: Natural Products and Related Compounds ((IUPAC Recommendations 1999) *Pure Appl.Chem.*, **71**, 587-643 (1999); Corrections and Modification (2004), *Pure*

Appl.Chem., **71**, 1283-1292 (2004);
10. Nomenclature for C_{60}-I_h and C_{70}-$D_{5h(6)}$ Fullerenes (IUPAC Recommendations 2002) *Pure Appl.Chem.*, **74**, 629-695 (2002);
11. Numbering of Fullerenes (Recommendations 2005), Pure Appl.Chem., **77**, 843-923 (2005);
12. IUPAC *Nomenclature of Inorganic Chemistry, Recommendations 2005*, RSC Publications, 2005;
13. Treatment of Variable valence in Organic Nomenclature (λ-Konwencja) (Recommendations 1983), *Pure Appl.Chem.*, **56**, 797-778 (1984);
14. International Union of Pure and Applied Chemistry. Division of Physical Chemistry. Commission on Symbols, Quantities and Units, I Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry, 2nd Ed. Blackwell Scientific Publications, Oxford, UK, 1993;
15. Extension of rules A-1.1 and A-2.5 Concerning Numerical terms Used in Organic Chemical Nomenclature (Recommendations 1986), *Pure Appl.Chem.*,**58**, 1693-1696 (1986)
16. International Union of Biochemistry and Molecular Biology, 'Biochemical Nomenclature and Related Documents', Portland Press Ltd., London (1992), See 'Nomenclature of Steroids (Recommendations 1989), 192-246;
17. International Union of Biochemistry and Molecular Biology, Biochemical Nomenclature and Related Documents', Portland Press Ltd., London (1992), See 'Nomenclature of Tetrapyrroles (Recommendation 1986)', 278-329;
18. International Union of Biochemistry and Molecular Biology, Biochemical Nomenclature and Related Documents', Portland Press Ltd., London (1992), See 'Nomenclature and Symbolism of Amino Acids and Peptides (Recommendations 1983)', 39-69;
19. International Union of Pure and Applied Chemistry. Compendium of Chemical Terminology (Gold Book), http://goldbook.iupac.org;
Kompendium terminologii chemicznej, ZamKor, Kraków 2005. ISBN 83-88830-79-1;
20. F.Reich and Th.Richter, *J.für Praktische Chemie,* **89**, 441 (1863); **90**, 175 (1863); **92**, 490 (1864);
21. Revision of the Extended Hantzsch-Widman System of Nomenclature for Heteromonocycles (Recommendations 1982), *Pure Appl. Chem.*, **55**, 409-416 (1983);
22. *The Ring Systems Handbook*, Chemical Abstracts Service, 1984, and supplements;
23. Glossary of Class Names of Organic Compounds and Reactive Intermediates Based on Structure (IUPAC Recommendations 1995) *Pure Appl. Chem.*,**67**, 1307-1376 (1995); Compendium of Chemical Technology, IUPAC Recommendations, 2nd Ed., A.D.McNaught, A.Wilkinsons, Compilers, Blackwell Science, 1997;
Glosariusz nazw klas związków organicznych i reaktywnych produktów pośrednich oparty na strukturze. Zalecenia 1994. , *Wiad. Chem. Biblioteka*, 2006,
24. Nomenclature of Cyclic Organic Compounds with Contigous Formal Double Bonds (δ-Convention) (Recommendations 1988), *Pure Appl. Chem.*,**60**, 1395-1401 (1988);
25. International Union of Pure and Applied Chemistry, 'Nomenclature and Terminology of Fullerenes: A Preliminary Report' *Pure Appl. Chem.*,**69**, 1411-1434 (1997);
26. W.Kern, M.Seibel, H.O.Wirth, Über die Synthese Methylsubstituierter *p*-Oligophenylene, *Makromoleculare Chem.*, **1959**, *29*, 164-189 (sp. 167)
27. International Union of Pure and Applied Chemistry and International Union of Biochemistry and Molecular Biology, Joint Commission on Biochemical Nomenclature, 'Nomenclature of

Carbohydrates (Recommendations 1996), *Pure Appl. Chem.*, **68**, 1919-2008 (1996);
Nomenklatura węglowodanów. Zalecenia 1996, *Wiad. Chem. Biblioteka*, 2000;
28. Glossary of Terms Used In Theoretical Chemistry, *Pure Appl. Chem.*,**71**, 1919-1981 (1999);
29. For a discussion on the meaning of 'natural composition' see 'IUPAC Commission on Atomic Weights', *Pure Appl. Chem.*,**37**, 591-603 (1974);
30. International Union of Biochemistry and Molecular Biology, 'Biochemical Nomenclature and Related Documents', Portland Press Ltd, London (1992). See 'Isotopically labeled compounds, Common biochemical practoce', pp. 27-28 and 'Isotopically substituted compounds' pp. 29-30;
31. W.A.Boughton, 'Naming Hydrogen Isotopes', *Science*, **79**, 159-160 (1934);
32. American Chemical Society, Chemical Abstracts Service, 'Chemical Substance Index Names. *Appendix IV, Chemical Abstracts Index Guide*, 220, 2231-2251;
33. IUPAC Names for Hydrogen Atoms (Recommendations 1988), *Pure Appl. Chem.*,**60**, 1115-1116 (1988);
34. R.S.Cahn, C.K.Ingold and V.Prelog, *Experientia*, **XII**, 81-124 (1956)
35. R.S.Cahn, C.K.Ingold and V.Prelog, *Angew.Chem.*, **78**,413-447 (1966); *Angew.Chem. Int.Ed.*, **5**, 385-415 (1966);
36. V.Prelog and G.Helmchen, *Angew.Chem.*, **94**,614-631 (1982); *Angew.Chem. Int.Ed.*, **21**, 567-583 (1982);
37. Basic Terminology of Stereochemistry (IUPAC Recommendation 1996), *Pure Appl. Chem.*,**68,** 2193-2222 (1996);
Podstawowa terminologia stereochemii, Zalecenia 1996, *Wiad. Chem. Biblioteka*, 1999;
38. Graphical Representation of Stereochemical Configuration (IUPAC Recommendations 2006), *Pure Appl. Chem.*, **78** (10), 1897-1970 (2006);
39. International Union of Biochemistry and Molecular Biology, 'Biochemical Nomenclature and Related Documents', Portland Press Ltd, London (1992). See 'Nomenclature of Cyclitols (Recommendations 1973)', 149-155;
40. International Union of Biochemistry and Molecular Biology, 'Biochemical Nomenclature and Related Documents', Portland Press Ltd, London (1992). See 'Nomenclature of Carotenoids (1970) and Amendments (1973)', 226-238;
41. P.Mata, A.M.Lobo, C.Marshall and A.P.Johnson, *Tetrahedron Asymmetry*,**4**, 657-668 (1993);
42. R.H.Custer, *Match*, **21**, 3 (1986);
43. H.Hirshmann and K.R.Hanson, *Tetrahedron*, **30**, 3649 (1974);
44. International Union of Biochemistry and Molecular Biology, 'Biochemical Nomenclature and Related Documents', Portland Press Ltd, London (1992). See 'Nomenclature of Tocopherols and Related Compounds, Recommendations, 1981, 239-241;
45. International Union of Biochemistry and Molecular Biology, 'Biochemical Nomenclature and Related Documents', Portland Press Ltd, London (1992). See 'Nomenclature of Corrinoids (Recommendations 1973)', 272-277;
46. International Union of Biochemistry and Molecular Biology, 'Biochemical Nomenclature and Related Documents', Portland Press Ltd, London (1992). See 'Nomenclature of Lignans and Neolignans, IUPAC Recommendations 2000', *Pure Appl.Chem.*, **72**, 1493-1523 (2000);
47. International Union of Biochemistry and Molecular Biology, 'Biochemical Nomenclature and Related Documents', Portland Press Ltd, London (1992). See 'Abbreviations and Symbols for Nucleic Acids, Polynucleotides and their Constituents (Recommendations 1970)' 109-114;

48. International Union of Biochemistry and Molecular Biology, 'Biochemical Nomenclature and Related Documents', Portland Press Ltd, London (1992). See 'Nomenclature of Lipids' (Recommendation 1976). 180-190;
49. International Union of Biochemistry and Molecular Biology, 'Biochemical Nomenclature and Related Documents', Portland Press Ltd, London (1992). See 'Nomenclature of Retinoids Recommendations 1981, *Pure Appl. Chem.*, **55**, 721-726;
50. International Union of Pure and Applied Chemistry and International Union of Biochemistry and Molecular Biology, Joint Commission on Biochemical Nomenclature, 'Nomenclature of Glycolipids, Recommendations 1997', *Pure Appl. Chem.*, **69**, 2475-2487 (1997).

ZAŁĄCZNIK 1 Lista starszeństwa pierwiastków i terminów 'a' używanych w nomenklaturze zamiennej ('a') szkieletu w porządku malejącego starszeństwa

ZAŁĄCZNIK 2 Przedrostki rozłączne stosowane w nomenklaturze podstawnikowej

ZAŁĄCZNIK 3 Struktury alkaloidów, steroidów, terpenoidów i podobnych związków podane w Tabelach 10.1, P-101.2.7, Rozdział 10

LISTA TABEL

ROZDZIAŁ P-1

Tabela 1.1 Pierwiastki uwzględniane w tych rekomendacjach
Tabela 1.2 Operacje nomenklaturowe
Tabela 1.3 Standardowe wiązalności dla pierwiastków grup 13, 14, 15, 16, i 17
Tabela 1.4 Podstawowe terminy numeryczne (przedrostki zwielokrotniające)
Tabela 1.5 Przedrostki zamiany szkieletu 'a'
Tabela 1.6 Przedrostki i przyrostki w nomenklaturze zamiennej funkcji

ROZDZIAŁ P-2

Tabela 2.1 Systematyczne nazwy mononuklearnych macierzystych wodorków pierwiastków z grup 13, 14, 15, 16 i 17 z normalnymi wiązalnościami
Tabela 2.2 Zachowane nazwy mancude* heteromonocyklicznych macierzystych wodorków
Tabela 2.3 Zachowane nazwy nasyconych heteromonocyklicznych macierzystych wodorków
Tabela 2.4 Przedrostki w systemie Hantzscha–Widmana (w porządku malejącego starszeństwa)
Tabela 2.5 Rdzenie nazw systemu Hantzscha – Widmana
Tabela 2.6 Zachowane nazwy macierzystych wodorków von Baeyera
Tabela 2.7 Zachowane nazwy węglowodorowych macierzystych składników pierścieniowych w zstępującym porządku starszeństwa
Tabela 2.8 Zachowane nazwy heterocyklicznych składników macierzystych w zstępującym porządku starszeństwa

Tabela 2.9 Nazwy azotowych składników macierzystych zmodyfikowane zamianą azotu na fosfor lub arsen

ROZDZIAŁ P-3

Tabela 3.1 Zachowane nazwy częściowo nasyconych policyklicznych wodorków macierzystych
Tabela 3.2 Zachowane nazwy podstawników dla częściowo nasyconych policyklicznych wodorków macierzystych
Tabela 3.3 Podstawowe preferowane i wstępnie wybrane przyrostki, w malejącym porządku starszeństwa wymieniane jako główna grupa charakterystyczna (preferowane są przyrostki zawierające atom węgla)
Tabela 3.4 Wrostek dla centrów rodnikowych i jonowych w nazwach struktur macierzystych

ROZDZIAŁ P-4

Tabela 4.1 Ogólne klasy związków wymienione w malejącym porządku starszeństwa
Tabela 4.2 Przedrostki i wrostki, w malejącym porządku starszeństwa, używane do tworzenia przyrostków wg nomenklatury zamiennej funkcji w preferowanych nazwach
Tabela 4.3 Przedrostki kwasu karboksylowego i sulfonowego tworzone wg nomenklatury zamiennej funkcji w preferowanych nazwach IUPAC w malejącym porządku starszeństwa
Tabela 4.4 Kompletna lista przyrostków i analogów tworzonych wg nomenklatury zamiennej funkcji w preferowanych nazwach IUPAC w malejącym porządku starszeństwa

ROZDZIAŁ P-5

Tabela 5.1 Grupy charakterystyczne wymieniane zawsze jako przedrostki w nomenklaturze podstawnikowej

ROZDZIAŁ P-6

Tabela 6.1 Przyrostki oznaczające peroksole (wodoronadtlenki) modyfikowane nomenklaturą zamienną funkcji (w malejącym porządku starszeństwa jako grupa główna)
Tabela 6.2 Przedrostki i przyrostki używane do tworzenia nazw kwasów siarki, selenu i telluru z atomami chalkogenów bezpośrednio związanymi z macierzystą strukturą
Tabela 6.3 Klasy haloidków i pseudohaloidków acylowych
Tabela 6.4 Przyrostki i przedrostki nazw chalkogenowych analogów aldehydów

ROZDZIAŁ P-7

Tabela 7.1 Przyrostki lub końcówki i przedrostki nazw rodników i jonów w nomenklaturze podstawnikowej
Tabela 7.2 Przyrostki nazw rodników amin, imin i amidów
Tabela 7.3 Zachowane wstępnie wybrane nazwy mononuklearnych macierzystych kationów pierwiastków z grup 15, 16 i 17
Tabela 7.4 Przyrostki nazw kationowych grup charakterystycznych
Tabela 7.5 Zachowane nazwy ‘ylium’ kationowych związków macierzystych

ROZDZIAŁ P-8

Tabela 8.1 Nazwy atomów i jonów wodoru

ROZDZIAŁ P-9

Tabela 9.1 Zwykle spotykane symbole poliedryczne w związkach organicznych

ROZDZIAŁ P-10

Tabela 10.1 Nazwy podstawowych struktur stereomacierzystych (lista nieograniczająca)
Tabela 10.2 Zachowane i systematyczne nazwy węglowodanów i struktury (w acyklicznej formie aldehydowej) aldoz o trzech do sześciu atomów węgla
Tabela 10.3 Struktury oraz zachowane i systematyczne nazwy węglowodanowe 2-ketoz o 3 do 6 atomach węgla.
Tabela 10.4 Aminokwasy i ich zwyczajowe nazwy (inne niż te wymienione w Tabeli 10.4)

LISTA RYSUNKÓW

ROZDZIAŁ P-1

Rys. 1.1 Porządek składników w nazwach podstawnikowych wywodzących się z nazw macierzystych wodorków
Rys. 1.2 Porządek składników w nazwie podstawnikowej wywodzącej się z nazwy związku o macierzystych funkcjach
Rys. 1.3 Porządek wprowadzania nawiasów

ROZDZIAŁ P-2

Rys. 2.1 Diagram konwersji nomenklatury fanów

ROZDZIAŁ P-9

Rys. 9.1 Porządek rankingu dla dwóch ligandów
Rys. 9.2 Klasyfikacja chiralności fullerenów według szablonu kolejnych podstawień
Rys. 9.3 Trzy różne sposoby przedstawienia dwóch konformerów A i B

ROZDZIAŁ P-10

Rys. 10.1 Reorientacja projekcji Fischer'a na projekcję Haworth'a

WSTĘP

To wydanie *Nomenclature of Organic Chemistry* następuje po opublikowanym przez Międzynarodową Unię Chemii Czystej i Stosowanej (IUPAC) w 1993 roku *A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds.* Zadaniem Międzynarodowej Unii Chemii Czystej i Stosowanej jest ustanawianie reguł systematycznej nomenklatury. Reguły dla związków organicznych były po raz pierwszy wydane w 1892 roku w Genewie. Po nich nastąpiły w roku 1930 reguły z Liége i kolejno reguły IUPAC w 1957 roku (Części A i B), w 1969 (Części A, B i C) zorganizowane jako Blue Book i w 1979 roku (Części A, B, C, D, E, F i H). W Przewodniku z 1993 roku zasygnalizowano potrzebę zaproponowania środowisku chemicznemu tak zwanej 'preferowanej', żeby nie powiedzieć 'unikalnej' nazwy IUPAC. Eksplozja informacji usprawiedliwia to nowe podejście do poprawiania zasad, reguł i konwencji nomenklatury związków organicznych. Preferowane nazwy IUPAC, określane przyjaznym akronimem PIN, są również ważne w sytuacjach prawnych, ujawnieniach patentowych, regulacjach eksportowo-importowych, informacjach zdrowotnych oraz bezpieczeństwa i komunikowania się w obrębie nauk o środowisku i ich prawnych konsekwencji.

Praca nad tym wydaniem rozpoczęła się w 1992 roku, w czasie kiedy Przewodnik z 1993 roku był w druku, pod fachowym przewodnictwem Commision on Nomenclature od Organic Chemistry (CNOC). Zachowany został ogólny kształt Przewodnika. Podstawowym celem było utrzymanie ciągłości i spójności. Ciągłość oznaczała zachowanie nomenklatury podstawnikowej jako podstawowej głównej nomenklatury do nazywania związków organicznych, opartej na koncepcji macierzystego wodorku i różnych hierarchicznych porządkach: porządek klas, porządek starszeństwa przyrostków, porządek starszeństwa pierścieni i układów pierścieni i porządek starszeństwa łańcuchów (łańcuch główny). Spójność wymagała uznania wodorków pierwiastków grup 13, 14, 15, 16 i 17 za macierzyste wodorki w nomenklaturze podstawnikowej i jednakowe traktowania atomów węgla i heteroatomów. Dla osiągnięcia tego celu nazwy wodorków heteroatomów kończą się na 'an', na przykład 'fosfan' dla PH_3 i 'silan' dla SiH_4. Ponieważ są one wybrane spośród kilku (nieorganicznych) nazw na przykład 'sulfan' i 'siarkowodór', te nazwy dla H_2S określa się jako 'nazwy wstępnie wybrane'; decyzja przyjęcia ich jako 'preferowane nazwy IUPAC' będzie podjęta później. Z tych wstępnie wybranych nazw tworzy się wstępnie wybrane przedrostki i przyrostki, na przykład 'sulfanyl' i 'sulfanyliden', odpowiednio, dla –SH i =S, używane w nomenklaturze podstawnikowej, tak jak preferowane przedrostki i przyrostki takie jak 'metyl', $-CH_3$, i 'fenyl', $-C_6H_5$.

Osiągnięcie systematyczności i spójności wymagało wprowadzenie szeregu zmian w poprzednich regułach. Dla ułatwienia zrozumienia i stosowania preferowanych nazw IUPAC zmiany te są wyjaśnione i uwydatnione w ramkach za każdym razem pojawienia się w rozdziałach od P-1 do P-8. W rozdziale P-6 zastosowano pełną systematyzację tworzenia przedrostków podstawników i grup funkcyjnych.

Mamy nadzieję, że systematyzacja zapewniona przez ścisłe stosowanie reguł będzie powszechnie zrozumiana i zaakceptowana. Preferowane nazwy IUPAC można łatwo wybrać. Jednakże jest rzeczą nie do uniknięcia pojawienie się dwuznaczności i nieoczekiwanych trudności. Zostanie utworzona grupa robocza, której zadaniem będzie szybkie odpowiadanie na pytania, udzielanie

wskazówek autorom i zapewnienie jednolitości systemu. Skomputeryzowana nomenklatura powinna pomóc w utrzymaniu jednolitości i zapewnieniu, że dalszy postęp będzie zdecydowanie spójny.

Jest ważnym powtórzeniem, że nomenklatura służy szeregu celom: porozumiewaniu się w mowie, działaniom handlowym i przemysłowym, pisanym naukowym komunikatom itd. Tak jak to już było wielokrotnie, podstawowym celem nomenklatury IUPAC jest jasność i tworzenie jednoznacznych nazw; musi zachodzi bezwzględnie jednoznaczna relacja pomiędzy strukturą i nazwą, i *vice versa* pomiędzy nazwą i strukturą. Preferowane nazwy IUPAC, które pojawiają się teraz, służą szczególnemu celowi; nie są narzucane chemicznej i naukowej społeczności. Reguły tu przedstawione są wyrazem zdecydowanego przekonania poprzedniej Commision on Nomenclature of Organic Chemistry i obecnej IUPAC Chemical Nomenclature and Structure Representation Division, że jest to najlepszy system nomenklatury do obecnych konkretnych celów i dla przyszłego rozwoju.

PODZIĘKOWANIA

Wielkie dzięki należą się dużej liczbie osób, które wniosły wkład do powstania tej książki. Kształtowanie projektu i nadzór na etapie powstawania wczesnych wstępnych wersji prowadzili członkowie IUPAC Commission on Nomenclature od Organic Chemistry (CNOC) od 1993 roku do jej rozwiązania w 2001 roku. Nazwiska członków CNOC od 1993 do 2001 roku są podane powyżej. W roku 2002 kierowanie projektem przejęła IUPAC Chemical Nomenclature and Structure Representation Division i śledziła jego rozwój do roku 2013 włącznie. Członkostwo w Division Committee od 2002 do 2013 roku jest również podane powyżej. Teraz jest okazja aby podziękować wszystkim członkom Division Committee i innym kolegom, którzy zgłosili ogólne i szczegółowe komentarze i/lub uczestniczyli w dyskusjach, albo korespondencyjnie albo za pomocą IUPAC Division VIII Webboard ulokowanej na stronie internetowej the Royal Society of Chemistry; podczas przygotowania pierwszej pełnej wersji w 2004 roku wpłynęło wiele komentarzy i sugestii. Wielkie, szczere podziękowania należą się Alanowi McNaught, który razem z autorami, spędził wiele dni przeglądając setki komentarzy i sugestii dotyczące wersji z 2004 co doprowadziło do poprawionej wstępnej wersji w 2010 roku, którą ponownie umieszczono dla oceny na Division VIII Webbord. Wiele uwag dotyczących wersji 2010 było po prostu powtórzeniem zgłaszanych poprzednio do wersji z 2004 roku. Znaczące i pożyteczne uwagi wpłynęły od Jonathana Brechera, Ursuli Bünzli-Trepp, Ture Damhus, Teda Godley, Harry'ego Gotlieba, Richarda Hartshorna, Karl-Heinza Hellwicha, Bernardo Herolda, Jaroslova Kahoveca, L. Maat, Pauliny Maata, Josefa Nyitrai, Arthura Maximienko, Andreya Yerin, Richarda Cammacka, Hala Dixona, Gernota Eller, Rity Hoyos de Rossi, Jana Reedijaka, Alexandra Senninga, L. Salvatella, Rogera Stayle i Herve Schepersa, prowadząc do tych zaleceń z 2013 roku. Należą się również podziękowania Marcusowi Ennis, który spędził tygodnie nad pełnym edytowaniem wersji 2013 pod względem błędów językowych i chemicznych.

WSTĘP DO WYDANIA POLSKIEGO

Międzynarodowa Unia Chemii Czystej i Stosowanej (IUPAC) przyjęła jako jedno ze swych podstawowych zadań dbanie i upowszechnianie poprawnej, spójnej i jednoznacznej terminologii chemicznej. Dotyczy to nie tylko pojęć, zjawisk i operacji chemicznych ale również metod nazywania związków chemicznych w szczególności związków organicznych. We wstępie do

wydania angielskiego wymieniono kolejne opracowania w tym zakresie. Praca nad ostatnią pozycją, (polskie tłumaczenie *Przewodnik do nomenklatury związków organicznych*,1994) wyraźnie uwidoczniła konieczność zmiany podejścia do nomenklatury, przejście od porządkowania pojawiających się sposobów ich nazywania do jak najdalej idącej systematyczności tworzenia nazw a w konsekwencji wprowadzeniem kategorii preferowanych nazw IUPAC. Ten ostatni postulat jest może najbardziej rzucającą się w oczy zmianą w podejściu do nomenklatury organicznej. Dotąd wszystkie metodologie tworzenia nazw były uznawane za równocenne, a działania IUPAC polegały na eliminowaniu sprzeczności i niejednoznaczności. Fakt ten podkreśla podtytuł książki: IUPAC Recommendations and Preferred Names 2013. Zamierzone cele nowej Blue Book i sposób ich osiągnięcia są pokrótce omówione we Wstępie. Bardziej szczegółowo odnosi się do tej kwestii rozdział omawiający wprowadzone zmiany, w porównaniu do reguł z wcześniejszych zaleceń, koniecznych dla osiągnięcia konsekwentnej systematyczności i jednoznaczności w tworzeniu nazw związków organicznych.

Prace nad obecną wersją Blue Book zapoczątkowane w 1992 roku trwały 21 lat! Książka w wersji papierowej i na nośniku elektronicznym ukazała się 2014 roku. Autorzy, bardzo przewidująco zastrzegli się, że wszelkie nieścisłości, nieprzewidziane niejednoznaczności, błędy itp. będą korygowane w następnych latach przez odpowiednią grupę roboczą.

Komisja Terminologii Chemicznej Polskiego Towarzystwa Chemicznego, a ściślej jej Podkomisja Chemii Organicznej w przeszłości opracowała polską wersję wszystkich reguł nomenklatury chemii organicznej wydanych przez IUPAC łącznie z Przewodnikiem do nomenklatury związków organicznych, który ukazał się w 1994 roku. Jego angielski oryginał był wzorem dla obecnie wydanej Blue Book, która jest dziełem znacznie obszerniejszym i obejmuje ponad 1600 stron. Na tak wielką objętość książki miały wpływ objęciem nomenklaturą organiczną nowych obszarów chemii (np. fullereny, fany) , związków większej liczby pierwiastków a nade wszystko metodyka tworzenia preferowanej nazwy IUPAC odróżniającej się od nazw, też skorygowanych, do użytku w poprawnej ogólnej nomenklaturze.

W roku 2014, w nowym składzie, podjęła działalność Komisja Terminologii Chemicznej Polskiego Towarzystwa Chemicznego. Przed Podkomisją Chemii Organicznej[1] stanęło zadanie przetłumaczenie i opracowanie polskiej wersji nowej Blue Book. Biorąc pod uwagę rozmiary tego dzieła konieczne było zaangażowanie licznej grupy tłumaczy tego pod każdym względem trudnego tekstu. Na wezwanie Polskiego Towarzystwa Chemicznego wszyscy podjęli ochotniczą pracę, a bez ich udziału polska wersja nie mogłaby powstać. Wszyscy uczestnicy, z określeniem wykonanych zadań, wymienieni są na iii stronie, a w tym miejscu składam im serdeczne podziękowania za bezinteresowne podjęcie się niewdzięcznej ale wymagającej pracy tłumacza, kosztem własnego czasu, który mogli wykorzystać na pracę zawodową bądź wypoczynek.

Ponieważ prace biegły indywidualnie bez możliwości stałych kontaktów i konsultacji w powstających tekstach pojawiały różne wersje tłumaczenia tych samych, czasem zdefiniowanych, terminów angielskich. Aby powstał spójny tekst bez różnic pomiędzy rozdziałami konieczne stało się ich ujednolicenie. To zadanie, w wyniku wielomiesięcznej żmudnej pracy, wykonała dr Barbara Szechner; należą się jej za to szczególne słowa uznania i podziękowania. Ponadto wprowadziliśmy, tam gdzie nie zrobili tego tłumaczący, ponad 100 stron korekt ogłoszonych w 2014 i 2015 roku przez

[1] Osman Achmatowicz (przewodniczący), Łukasz Albrecht, Piotr Bałczewski, Tomasz Janecki i Barbara Szechner

wspomnianą wyżej grupę roboczą IUPAC. Dodam, że sami wysłaliśmy do IUPAC ponad 30 stron korekty tekstu angielskiego.

Podjęliśmy się jednak nie tylko korekty terminologicznej śladem IUPAC. Przypomnę, że podstawowym celem pracy IUPAC nad 'Nomenclature of Organic Chemistry IUPAC Recommendations and Preferred Names 2013' było takie skodyfikowanie nomenklatury organicznej żeby osiągnęła poziom systematyczności i jednoznaczności umożliwiający skomputeryzowanie nomenklatury, zachowania spójności z nowo powstającymi dziedzinami i możliwość wprowadzenie preferowanej nazwy IUPAC. Realizacja tego celu wymagała wprowadzenia licznych zmian w dotychczasowych regułach IUPAC często wbrew przyjętej praktyce. Podobny cel przyświecał nam przy pracy nad polską wersją Blue Book. Zachowując zasady wynikające z gramatyki i ortografii języka polskiego wprowadziliśmy szereg terminów dotyczących klas związków, przedrostków, wrostków i przyrostków dążąc do systematyczności i spójności nazw związków organicznych. Wszystkie nasze propozycje, i te wynikające z gramatyki i ortografii, zebrane są w podrozdziale na xxxii stronie. Trudno jest dyskutować powody i zasadność proponowanych zmian/nowości. Każdy osobno może się wydawać mało przekonywujący i niepotrzebnie łamiący przyjęte przyzwyczajenia. Trzeba się jednak przyjrzeć całości nomenklatury organicznej, a może nawet szerzej chemicznej, żeby móc ocenić sens i zasadność naszych propozycji. Na taką dyskusję, krytykę i propozycję innych rozwiązań liczymy ze strony Czytelników.

Polska Blue Book 2013 ukazuje się na stronie Internetowej Komisji Terminologii Chemicznej Polskiego Towarzystwa Chemicznego, jest więc powszechnie dostępna. Ale jest to wersja tymczasowa. Dopiero po wysłuchaniu uwag wszystkich zainteresowanych a zwłaszcza uczestników zespołu tłumaczy, dyskusji i uwzględnieniu uwag oraz stale napływających z IUPAC korekt pierwsze wydanie polskiej Blue Book 2013 będzie ukończone i warte opublikowania.

Proszę o nadsyłanie wszystkich uwag, które mogą się nasunąć czytelnikowi tych reguł na adres internetowy: oachmatowicz@gmail.com

ZMIANY WPROWADZONE DO WYDANIA *NOMENKLATURY ZWIĄZKÓW ORGANICZNYCH* Z 2013 ROKU W STOSUNKU DO WYDANIA Z 1979 ROKU, *PRZEWODNIKA* Z 1993 ORAZ OFICJALNYCH PUBLIKACJI IUPAC Z LAT 1993-2002

1. Zakres rekomendacji w wydaniu z 2013 roku

(a) Do pierwiastków występujących w wydaniu nomenklatury z 1979 r. (lit.1) i w *Przewodniku* z 1993 r. (lit.2) dodaje się Al, Ga, In i Tl.

2. Nomenklatura zamienna (a) szkieletu

(a) Tworząc nazwy łańcuchów przy zastosowaniu nomenklatury zamiennej ('a') heteroatomy uważa się za integralną część macierzystego wodorku i wskazuje rozłącznymi przedrostkami, które w numerowaniu mają pierwszeństwo przed przyrostkami; tak więc nomenklatura zamienna ('a') szkieletu traktuje heteroacykliczne łańcuchy tak samo jak heterocykliczne pierścienie.
(b) W nomenklaturze zamiennej heteroatomy P, As, Sb, Bi, Si, Ge, Sn, Pb, B, Al, Ga, In i Tl mogą obecnie występować na krańcach łańcucha, w poprzednich zaleceniach łańcuchy w związkach heteroacyklicznych nazywanych według nomenklatury zamiennej (‘a’) musiały kończyć się atomami węgla.
(c) Nie należy używać przedrostków zamiennych (‘a’) kończących się –ata, np. borata.
(d) Grupy heteroatomów o wspólnej multiwalencyjnej nazwie traktuje się jako jednostkę, stąd pojęcie heterojednostka obejmuje zarówno heteroatomy jak i grupy heteroatomów. W poprzednich zaleceniach takie grupy heteroatomów nie były uważane za pojedynczą heterojednostkę.
(e) Zastosowanie przedrostków zamiennych ‘a’ szkieletu dla pierwiastków grup 1-12 w nomenklaturze zamiennej szkieletu jest główną zmianą, chociaż nazwy związków metaloorganicznych zawierających te pierwiastki traktować należy jako wstępnie wybrane.

3. Nomenklatura podstawnikowa

(a) Nomenklatura podstawnikowa jest preferowaną metodą nomenklatury nie stosuje się jej jednak w przypadku bezwodników, estrów i soli, halogenków i pseudohalogenków acylowych, które nazywa się tradycyjnie przy pomocy nomenklatury klasowo-funkcyjnej. Nomenklatura podstawnikowa opiera się na nazwach macierzystych wodorków modyfikowanych przedrostkami i przyrostkami. Nazwy macierzystych wodorków mogą być modyfikowane przez zastosowanie nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu oraz nomenklatury zamiennej funkcji a także w wyniki operacji addytywnych (np. addycja atomów wodoru lub jonów) lub subtraktywnych (usunięcia atomów wodoru lub jonów).
(b) W preferowanych nazwach IUPAC zaleca się uogólnioną nomenklaturę ‘-an’ . Nomenklaturę podstawnikową stosuje się dla każdego pierwiastka z grup 13, 14, 15, 16 i 17 połączonego z określoną liczbą atomów wodoru i tworzącego mono- lub polinuklearne macierzyste wodorki tak samo jak alkany. Zalecanymi nazwami są aluman dla AlH_3, gallan dla GaH_3, indigan dla InH_3 i tallan dla TaH_3. Przyrostki i przedrostki dodaje się tak samo jak w przypadku alkanów, na przykład kwas trisulfanokarboksylowy dla HSSS-COOH, trimetylosilanol dla $(CH_3)_3Si$-OH, fenylostibanon dla C_6H_5-Sb=O i trimetyloaluman dla $(CH_3)_3Al$.
(c) Zachowuje się niektóre zakorzenione i szeroko używane nazwy zwyczajowe macierzystych wodorków: metan, etan, propan i butan dla alkanów, a także nazwy mono- i policyklicznych związków karbocyklicznych i heterocyklicznych używane do tworzenia nazw policyklicznych pierścieni skondensowanych. Liczba zachowanych nazw funkcyjnych związków

macierzystych i grup charakterystycznych została zmniejszona, tak jak to dzieje się w każdej kolejnej edycji Nomenklatury Związków Organicznych IUPAC.

(d) Toluen i ksylen pozostają jako preferowane nazwy IUPAC, ale nie zawsze mogą być stosowane dla ich podstawionych pochodnych. Tylko pod pewnymi warunkami i tylko w ogólnej nomenklaturze można utworzyć nazwę podstawionego toluenu. Nazwa mezytylen może być stosowana wyłącznie dla niepodstawionego związku i tylko w ogólnej nomenklaturze. W Przewodniku z 1993 (2) nazwy zwyczajowe tych macierzystych wodorków zostały również zachowane, ale dozwolone było tylko ich ograniczone podstawienie.

(e) Hydrazydyny nazywa się systematycznie jako 'hydrazonohydrazydy' a nie jako hydrazony odpowiednich hydrazydów jak podano w zaleceniach z 1979 roku (1).

(f) Oksymy nazywa się podstawnikowo ylidenowymi pochodnymi hydroksyloaminy a nie, jak w poprzednich zaleceniach, według nomenklatury klasowo-funkcyjnej.

(g) Hydrazony i azyny nazywa się podstawnikowo ylidenowymi pochodnymi hydrazyny, a nie, jak w poprzednich zaleceniach, według nomenklatury klasowo-funkcyjnej.

4. Nomenklatura multiplikacyjna

(a) Nomenklaturę multiplikacyjną rozszerza się obecnie na związki pierścieniowe, zawierające lub nie zawierające, grupy charakterystyczne; łańcuchy zbudowane tylko z atomów węgla są nadal wykluczone. W poprzednich zaleceniach nomenklatura multiplikacyjna ogranicza się do związków z grupami charakterystycznymi wskazywanymi przyrostkami lub implikowanymi przez zachowaną nazwę, oraz do heterocyklicznych wodorków macierzystych. Obecnie system ten rozszerza się i zezwala na podstawienie centralnej jednostki multiplikowanej grupy a, w pewnych warunkach, na niesymetryczną jednostkę centralną.

(b) Zgodnie z obecnymi zaleceniami nazwa multiplikacyjna związku może być utworzona gdy wszystkie jego podstawniki łącznie z główną grupą charakterystyczną są takie same i mają ten sam lokant. Jest to zmiana w stosunku do poprzednich zaleceń według których lokanty nie musiały być identyczne.

5. Przedrostki hydro- i dehydro- w nazwie wskazują operację addycji lub subtrakcji i traktuje się je obecnie jako rozłączne, ale nie miesza z rozłącznymi przedrostkami wskazującymi podstawniki, wymienianymi alfabetycznie. W nazwach przedrostki hydro- i dehydro mają ustalone miejsce, miedzy nierozłącznymi przedrostkami umieszczanymi bezpośrednio przed nazwą związku macierzystego i wymienionymi alfabetycznie rozłącznymi przedrostkami, wskazującymi podstawniki. Przejście od nierozłącznych do nie-alfabetyzowanych rozłącznych przedrostków daje przedrostkom hydro i dehydro ten sam status w wyborze numerowania jaki ma subtrakcja atomów wodoru wskazywana końcówką -en lub –yn. Gdy obecne są oba przedrostki dehydro- wyprzedza hydro-. Wraz z przedrostkami hydro- i dehydro- stosuje się przedrostki zwielokrotniające di-, tetra- itd. Przedrostki hydro- i dehydro- otrzymują lokanty zgodnie z zasadą najniższych lokantów i w zgodzie z numerowaniem macierzystego wodorku, po przyznaniu pierwszeństwa wskazanemu atomowi wodoru, dodanemu atomowi wodoru i przyrostkom, tak jak nakazują ogólne reguły numerowania.

6. Przyrostki

(a) Do listy podstawowych przyrostków dodano przyrostek peroksol dla –OOH. Przyrostek ten modyfikowany według nomenklatury zamiennej funkcji tworzy przyrostki –*OS*-tioperoksol dla –OSH, *SO*-tioperoksol dla –SOH. W zaleceniach z 1993 roku zarzucono użycie dla -SOH nazwy kwas sulfenowy.

(b) Systematyczne przyrostki, np. kwas metanoimidowy, kwasy imidowe, kwasy hydrazonowe, kwasy peroksykarboksylowe i analogi chalkogenowe są zmianą nazwy kwasu mrówkowego, kwasu octowego, kwasu benzoesowego i kwasu szczawiowego.
(c) Przyrostki stosuje się obecnie w zgodzie ze starszeństwem klas (patrz P-41) związków germanu, cyny i ołowiu co jest zmianą w stosunku do poprzednich zaleceń kiedy stosowano jedynie przedrostki.

7. Przedrostki

(a) Wstępnie wybrany przedrostek ‘nitrylo’ stosuje się tylko wtedy gdy trzy wiązania atomu azotu połączone są z różnymi atomami; nie używa się go obecnie dla struktury -N= która ma wstępnie wybrany przedrostek ‘azanylyliden’.
(b) Wstępnie wybrany przedrostek azanodiyl- utworzony od wybranego macierzystego wodorku azanu używa się obecnie dla wskazania multiplikacyjnego podstawnika –NH-; wstępnie wybrany przedrostek imino- stosuje się wyłącznie do wskazania jako podstawnika grupy =NH.
(c) Przedrostki wywodzące się z nazwy boran tworzy się się obecnie tylko za pomocą ogólnej metody [metoda 2 w P-29.2], czyli boranyl, boranyliden, boranylidyn a nie metodą stosowana dla związków pierwiastków grupy 4 [Metoda 1 w P-29.2]; likwiduje się przedrostek boryl-.
(d) Wybrane wstępnie przedrostki sulfanyliden, selanyliden i tellanyliden, odpowiednio, dla =S, =Se i =Te jako przedrostków stosuje się w preferowanych nazwach IUPAC (PIN) do wskazania chalkogenowych analogów wstępnie wybranego przedrostka ‘okso’. W ogólnej nomenklaturze można stosować przedrostki zamienne funkcji, tiokso, selenokso i tellurokso. W preferowanych nazwach IUPAC stosuje się proste podstawnikowe przedrostki grup acylowych wyprowadzone z nazw ‘kwas sulfonowy’, ‘kwas sulfinowy’ oraz nazw ich chalkogenowych analogów takich jak benzenosulfonyl czy benzenotelluroditionyl w miejsce przedrostków utworzonych przez połączenie, np. fenylosulfonyl. Te ostatnie można stosować w ogólnej nomenklaturze.
(f) Preferowane nazwy IUPAC nie uwzględniają przedrostków ureido- i uroileno-. Zamiast nich zarówno w preferowanych jak i ogólnych nazwach stosuje się przedrostki karbamoiloamino-, karbonylobis(azanodiylo)-.
(g) W preferowanych nazwach IUPAC nie stosuje się przedrostka guanidyno-; zalecanym przedrostkiem jest karboamimidoiloamino.
(h) W preferowanych nazwach IUPAC nie stosuje się przedrostka amidyno-.; zalecanym przedrostkiem jest karboamimidoil-.
(i) Przedrostek *aci*-nitro- dla HO-N(O)= nie jest już akceptowany w preferowanych nazwach IUPAC. Preferowanym przedrostkiem jest hydroksy(okso)-λ^5-azanyliden; przedrostek zalecany w Przewodniku z 1993 r. (2) hydroksynitroryl jest akceptowany w tych zaleceniach; zgodnie z nimi dwie wolne wiązalności powinno się być wskazywane jako yliden- lub diyl-.
(j) Wstępnie wybrane przedrostki utworzone z nazwy wstępnie wybranego macierzystego wodorku hydrazyny tworzy się obecnie systematycznie z nazwy hydrazyny: hydrazynyl- dla H_2N-NH-, hydrazynyliden- dla H_2N-N=, hydrazynodiyliden- dla =N-N= i hydrazyno-1,2-diyl- dla –NH-NH-. Przedrostki hydrazyno, hydrazono-, azyno- i hydrazo- nie są już akceptowane nawet w ogólnej nomenklaturze.
(k) Przedrostki benzyl-, benzyliden- i benzylidyn- nie mogą być podstawione w preferowanych nazwach IUPAC, aczkolwiek w ogólnej nomenklaturze dopuszcza się ograniczone podstawienie (patrz P-29.6.2). Wg Przewodnika z 1993 r. (2) przedrostki te można było stosować tylko dla związków podstawionych w pierścieniu.
(l) Preferowane przedrostki utworzone z ‘triazan’ i ‘tetrazan’ są nazywane systematycznie tak jak węglowodory, na przykład: ‘triazan-1-yl’, ‘tetrazan-1-yl’. Przedrostki ‘triazano’ i ‘tetrazano’, używane poprzednio zamiast ‘triazan-1-yl’ i ‘tetrazen-1-yl’ a także jako mostkowe przedrostki

(dla mostków), nie powinny być używane chociaż jako mostkowe przedrostki noszą obecnie nazwę epitriazano itd.

(m) Przedrostki grup acylowych utworzone z nazw węglowodorowych wodorków macierzystych i przedrostki takie jak okso, tiokso, sulfanilideno i imino, np. 1-oksopropyl nie są preferowane w preferowanych nazwwch IUPAC ale mogą być stosowane w ogólnej nomenklaturze; takie przedrostki występują w indeksach CAS.

(n) Analogi zamienne funkcji w kwasach mrówkowym, octowym, benzoesowym i szczawiowym i utworzone z nich przedrostki acylowe nazywa się systematycznie, np. kwas metanoimidowy a nie kwas formimidowy, benzenokarboksyimidoil a nie benzoimidoil i kwas etanodiperoksowy a nie kwas diperoksyszczawiowy.

(o) Proste przedrostki wymienia się przed przedrostkami rozpoczynającymi się od przedrostków zwielokrotniających, w poprzednich zaleceniach stosowano bis, tris itd.

(p) Do listy grup, które w nomenklaturze podstawnikowej zawsze wskazywane są przedrostkami dodano grupę –N=C=O, jej chalkogenowe analogi i grupę –NC. W preferowanej nomenklaturze IUPAC po związaniu z macierzystym wodorkiem wskazuje się je przedrostkami izocyjaniano, izotiocyjaniano, izotellurocyjaniano i izocyjano. W poprzednich zaleceniach związki takie można było nazywać stosując nomenklaturę klasowo-funkcyjną.

(q) Potencjalnie dwuznaczne nazwy piorunian (fulminian) i pioruniano (fulminiano) zarzuca się na korzyść nazw systematycznych.

8. Lokanty

(a) Cyfry arabskie jako górne indeksy stosuje się obecnie do rozróżnienia atomów azotu w symetrycznych geminalnych diaminach, diiminach, diimidamidach, diamidynach, dihydrazonoamidach i/lub imidohydrazydach, diamidrazonach i dihydrazonohydrazydach i dla atomów azotu, które nie są częścią głównego łańcucha w nazwach imidodi-, poliimido- oraz di- i polinuklearnych łańcuchów kwasów w tym kwasów di- i polikarbonowych. W poprzednich zaleceniach stosowano primowanie, pojedyncze (′), podwójne (″) potrójne (‴) itd.

(b) Cyfry arabskie jako górne indeksy stosuje się obecnie do wskazywania pozycji atomów chalkogenów w di- i polinuklearnych oksokwasach, włączając kwasy di- i di- i polikarbonowe.

(c) Nie używa się już lokantów liczbowych w nazwach IUPAC mocznika, tiomocznika, skondensowanego mocznika, semikarbazydu, semikarbazonu, karbadiazonu i kationu uronium.

(d) Lokanty N i N' stosuje się dla grup $–NH_2$ i =NH w amidynach, w miejsce stosowanych w myśl zaleceń z 1979 r (1) lokantów N^1 i N^2.

9. Systemy acykliczne

(a) W homogenicznych strukturach acyklicznych w wyborze preferowanego acyklicznego związku macierzystego oraz preferowanego łańcucha reprezentowanego preferowanym przedrostkiem przedkłada się długość łańcucha względem nienasycenia. Jest to odwrotność zasad z poprzednich zaleceń.

(b) Nomenklatury heteroacyklicznych łańcuchów a(ba) nie można stosować gdy atom ‘b’ jest atomem azotu lub węgla; stanowi to zmianę w stosunku do Przewodnika z 1993 r. (2) gdzie grupa charakterystyczna „amina” w takich systemach nie była uwzględniana , a atom węgla nie był wykluczany jako element ‘b’.

10. System Hantzscha-Widmana

(a) Z systemu nazewnictwa Hantzscha-Widmana usuwa się pierwiastek rtęć.

(b) Włączenie pierwiastków z grup 1-12 do systemu tworzenia nazw Hantzscha-Widmana jest dużą zmianą, choć związki metaloorganiczne zawierające te pierwiastki pozostają na razie jedynie wstępnie wybranymi.

11. Policykliczne układy pierścieniowe

(a) Wskazany atom wodoru (patrz P-14.7.1) w nazwach skondensowanych mostkowych układów pierścieniowych, spiranowych układów pierścieniowych (patrz P-24.3.2) i zespołów pierścieni (patrz P-28.2.3) stosuje się teraz tak samo jak w przypadku mancude[2] monocyklicznych i policyklicznych skondensowanych układów pierścieniowych (patrz P-25.7.1.1). Operacja jest prosta. Najpierw rysuje się szkielet związku i dodaje heteroatomy. Następnie wprowadza się maksymalną liczbę nie-skumulowanych wiązań podwójnych i w końcu wymienia wskazane atomy wodoru wszystkich nasyconych pozycji, zgodnie ze strukturą układu pierścieniowego, to jest wtedy, gdy istnieją dwa wiązania w pierścieniu i wystarczająca liczba wiązań ‘egzo’ aby spełnić wiązalność atomu.

(b) Nazwy skondensowane można używać do preferowanych nazw IUPAC tylko wtedy, gdy w związku występują co najmniej dwa, pięcio lub więcej członowe, pierścienie, co jest zgodne z zaleceniami z 1979 r. (1) ale rozbieżne z rekomendacjami dla pierścieni skondensowanych z 1999 (patrz FR-0, odnośnik 4) i w Przewodniku z 1993 r. (2) w których nie było żadnych ograniczeń co do liczby i wielkości pierścieni by można było utworzyć nazwę zgodnie z zasadami nomenklatury skondensowanej. W ogólnej nomenklaturze również nie ma żadnych ograniczeń co do wielkości i liczby pierścieni w układach pierścieni skondensowanych.

(c) Nie usuwa się samogłoski z nazwy skondensowanego przedrostka jeżeli następuje po nim inna samogłoska w preferowanej nazwie IUPAC skondensowanego układu pierścieni, jak opisano w regule P-25.3.1.3, która jest kontynuacją reguły R-2.4.1.1 Przewodnika z 1993 roku (2), która unieważniła usunięcie samogłoski zalecane przez regułę A-21.4 w wydaniu z 1979 r. (1).

(d) Systematyczne nazwy ‘benzo’, np. 2*H*-1-benzopiran, są preferowanymi nazwami IUPAC dla chromenu, izochromenu, chromanu, izochromanu i ich chalkogenowych analogów używanymi w poprzednich wydaniach (1 i 2).

(e) Zaleca się nowy system numerowania zespołów pierścieni zbudowanych z więcej niż dwóch pierścieni lub układów pierścieni. Nowy system lokantów tworzy złożone lokanty składające się ze zwykłych cyfr arabskich identyfikujących kolejne pierścienie i cyfr indeksów górnych będących rzeczywistymi lokantami układu pierścieniowego. Metoda taka pozwala tworzyć preferowane nazwy IUPAC, natomiast metody poprzednie (1 i 2), w których lokanty pierścieni oznaczano primami, podwójnymi primami itd. mogą być stosowane w ogólnej nomenklaturze.

(f) Nienasycenie w zespołach pierścieni wskazuje się końcówkami –en, -yn itd. umieszczanymi za końcowymi nawiasami nazwy zespołu pierścieni; metoda ta umożliwia nazwanie zespołów pierścieni z niesymetrycznie umieszczonymi podwójnymi wiązaniami. Jest to zmiana w stosunku do reguł z 1979 r. i Przewodnika z 1993 r. (1 i 2), pozostająca jednak w zgodzie z metodą opisaną dla spirozwiązków w publikacji z 1999 r, (4).

(g) W nomenklaturze zamiennej heterocyklicznych związków skondensowanych z mostkami, heterocyklicznych układów pierścieniowych spiro i heterocyklicznych zespołów pierścieni przedrostki 'a' są nierozłączne i wymieniane przed nazwą macierzystą. Technika ta pozwala nazywać niesymetryczne związki heterocykliczne. Poprzednio przedrostki zamienne ('a') zamieszczano przed nazwą pierścienia do którego się odnosiły.

(h) Zaleca się następujące nazwy, jako wstępnie wybrane (P-12.2), przedrostki dla mostków: sulfano dla –S-, disulfano dla –SS- , selano dla –Se-, tellano dla –Te-, azano dla –NH-, epitriazano dla –NH-NH-NH- i epitriaz[1]eno dla –NH-N=N-. Przedrostki dla mostków: epitio,

[2] Akronim: MAximum number of Non-CUmulated DoublE bonds

epiditio, episeleno, epitelluro and epimino [4, FR-8.3.1(d)] można używać w ogólnej nomenklaturze.

12. Starszeństwo

(a) Ustalanie starszeństwa policyklicznych układów pierścieniowych obecnie ułatwia hierarchiczny porządek układów pierścieniowych, obejmujący układy cyklicznych i acyklicznych fanów. Porządek starszeństwa policyklicznych układów pierścieniowych macierzystych wodorków o tej samej liczbie identycznych heteroatomów, tej samej liczbie pierścieni i tej samej liczbie atomów szkieletu daje następującą kolejność malejącego starszeństwa: związki spiro > cykliczne układy fanów > skondensowane układy pierścieni > skondensowane układy pierścieni z mostkami > układy von Baeyera > liniowe układy fanów > zespoły pierścieni. Porządek ten różni się od podawanego w poprzednich zaleceniach.

(b) W zgodzie z pierwszeństwem klas (patrz P-41) związki takie jak R-NH-Cl, R-NH-NO i R-NH-NH_2 nazywa się jako pochodne amidów (patrz P-67.1.2.6) a związki takie jak R-NH-OH nazywa się jako *N*-pochodne hydroksyloaminy, NH_2-OH (patrz P-68.3.1.1.1) a nie jako *N*-podstawione aminy jak w poprzednich zaleceniach.

13. **Addukty** zbudowane wyłącznie ze związków organicznych mają wzory, w których indywidualne składniki wymienia się kolejno zgodnie ze starszeństwem klas (patrz P-41) a nie odpowiednio do liczby rodzajów w addukcie ani w zgodzie z alfanumerycznym porządkiem jak zalecano w regułach z 1979 r. (1, reguła D-1.55) i w poprawionej Nomenklaturze Chemii Nieorganicznej, Zalecenia 2005 (12). We wzorach adduktów złożonych ze związków organicznych i nieorganicznych, związki organiczne wyprzedzają nieorganiczne. Nazwy tworzy się wymieniając poszczególne składniki w kolejności w jakiej występują we wzorach. Stosowanie kolejności starszeństwa klas, uniwersalnego systemu, jako kryterium pierwszeństwa jest preferowane, w nazwach preferowanych przez IUPAC i nazwach ogólnych, w stosunku do zależnego od języka porządku alfanumerycznego.

14. Nawiasy

(a) Nazwy takie jak cykloheksanokarbonyl i benzenosulfonyl zamyka się w nawiasach chociaż są prostymi przedrostkami. Ma to ułatwić interpretację nazwy przez unikanie złudzenia, że istnieją dwa macierzyste wodorki. Jest to zmiana w stosunku do *Przewodnika* z 1993 r. (lit.2).

(b) Przy stosowaniu normalnej kolejności nawiasów mogą być konieczne dwa lub więcej kolejnych nawiasów tego samego poziomu ponieważ niezależne nawiasy np., dla stereodeskryptorów powinny być wprowadzone do niezależnej części nazwy. Nawiasy dla niezależnego nomenklaturowo fragmentu, dla uniknięcia nieporozumienia, przenosi się do następnego poziomu.

(c) W nazwach pierścieni skondensowanych nawiasy używa się po liczbowych przedrostkach bis, tri itd. wskazujących wielokrotność występowania macierzystego składnika. Jest to zmiana w stosunku do zaleceń z 1998 r. w publikacji o związkach skondensowanych (4).

15. Estry

Nazywając estry organiczne stosuje się operację multiplikacji. W tym przypadku bi- lub poliwiązalna nazwa klasowo-funkcyjna jest multiplikatorem i musi być wymieniana jako pierwsza grupa organylowa (alkil, aryl itd.) w postaci oddzielnego wyrazu po nazwie anionu utworzonego z odpowiedniego kwasu (patrz P-72.2.2.1) a nie alfabetycznie wspólnie z innymi jednowiązalnymi grupami organylowymi, jak opisano we wcześniejszych rekomendacjach.

16. Amidy

Kiedy amid jest główną funkcją, musi być nazwany jako główna grupa. Stąd grupę *N*-acylową połączoną z atomem azotu układu heterocyklicznego nazywa się obecnie jako pseudoketon (patrz P-64.3). Zachowuje się, ale tylko w ogólnej nomenklaturze (patrz 66.1.3), metodę uważania amidów za podstawniki policyklicznych układów pierścieniowych, jak opisano w *Przewodniku* z 1993 r. (lit. 2).

17. Nieorganiczne struktury macierzyste

(a) Dla zachowania spójności, w nazwach polinuklearnych okso-kwasów liczbowy wrostek ‘di-’ stosowany jest jednolicie w nazywach dinuklearnych ‘hypo’ kwasów, np. kwas hypodifosforowy a nie kwas hypofosfofosforowy.

(b) Amidy i hydrazydy kwasów azotowego oraz azotawego nazywa się obecnie systematycznie jako amidy i/lub hydrazydy azotanu lub azotynu, godnie z regułą starszeństwa klas, a nie jako nitro i nitrozo aminy; te ostatnie nazwy mogą być stosowane w ogólnej nomenklaturze.

(c) Ponieważ nazwa ‘kwas disiarkowy (IV)’jest używana dla związku HO-SO-SO_2-OH w *Nomenklaturze Chemii Nieorganicznej* (lit.12) to nie można jej stosować w sposób systematyczny dla związku HO-SO-O-SO-OH. Dlatego też wstępnie wybraną nazwą tego ostatniego jest 1,3-dihydroksydisulfoksano-1,3-dion, a wstępnie wybraną nazwą pierwszego jest bezwodnik siarkowo-siarkawy.

18. Rodniki i jony

(a) Rodniki utworzone z amin i amidów nazywa się stosując przyrostki takie jak ‘-aminyliden’, ‘-amidyliden’ i ‘-karboksyamidyliden’. W poprzednich zaleceniach takie rodniki były nazywane jako pochodne ‘nitrenu’, ‘aminylenu’ lub ‘λ^1-azanu’.

(b) Przy wyborze starszego macierzystego rodnika, starszego macierzystego anionu i starszego macierzystego kationu prawidłowym kryterium jest maksymalna liczba rodnikowych, anionowych bądź kationowych centrów na pierwszym w kolejności klas (P-41) atomie, atomie szkieletu wymienianym jako pierwszy w kolejności starszeństwa klas: N > P > As > Pb > Al > Ga > In > In > Tl > O > S > Se >Te > C. W poprzednich zaleceniach o kolejności decydowała kolejność przedrostków zamiennych (‘a’).

(c) Preferowaną nazwę IUPAC dla anionu utworzonego przez usunięcie hydronu z atomu chalkogenu (O, S, Se i Te) charakterystycznej grupy peroksykwasu tworzy się zamieniając ‘kwas –owy’ lub ‘kwas –awy’, odpowiednio, na ‘-an’ lub ‘-id’. W poprzednich zaleceniach (3, RC-83.1.6,) takie aniony nazywano na bazie anionowych wodorków macierzystych.

(d) Użycie złożonych przyrostków ‘aminid’, ‘iminid’, i ‘aminodiid’ jest zmianą w stosunku do poprzedniej praktyki kiedy dla przedstawienia amin i imin z ujemnymi ładunkami stosowano macierzyste aniony H_2N^- i HN^{2-}.

(e) Związków zwitterjonowych o jonowych centrach w tej samej strukturze macierzystej nie uważa się za związki obojętne do nazw których można dodawać przyrostki. W poprzednich zaleceniach takie związki zwitterjonowe uważano za neutralne i do ich nazw można było dodawać przyrostki.

19. Związki modyfikowane izotopowo

(a) Modyfikowane izotopowo atomy lub grupy, które nie są identycznie modyfikowane w równoważnych pozycjach, przedstawia się oddzielnie. Jest to zmiana w stosunku do Części H Zaleceń z 1979 r. (lit.1) i do Przewodnika z 1993 r. (lit.2).

(b) Izotopowo znaczone atomy wodoru w uwodornionych mancude [1] systemach pierścieniowych, które nie są identycznie modyfikowane, przedstawia się oddzielnie. Jest to zmiana w stosunku do poprzednich zaleceń.

20. ZMIANY

Powtarzamy za Przewodnikiem do Nomenklatury Organicznej z 1993 roku:

1° Zgodnie z ostatnim zaleceniem IUPAC lokant umieszczany jest bezpośrednio przed wrostkiem, do którego się odnosi (np. propan~2-ol), z wyjątkiem nazw skróconych, w których umieszczany jest na początku nazwy, (np. 2-pirydyl).

2° Nowością w polskiej nomenklaturze jest wprowadzona końcówka "-ium dla wskazania kationu utworzonego przez przyłączenie hydronu do atomu szkieletu macierzystego wodorku (np. pirydynium). Nie wyklucza to możliwości używania nazw klasowo-funkcyjnych (np. kation pirydyniowy).

3° W nazwach składających się z dwóch lub więcej słów wszystkie składniki są rzeczownikami (np. octan etylu, chlorek pirydynium), z wyjątkiem nazw klasowo-funkcyjnych,[2] w których nazwa funkcji ma formę przymiotnikową (np. eter dietylowy, keton etylowo-metylowy).

W tłumaczeniu Blue Book wydanie 2013 wprowadziliśmy dalsze zmiany:

4° W celu zachowania spójności z od dawna istniejącymi w polskiej nomenklaturze organicznej nazwami, w których występowanie atomu tlenu wyrażane jest terminem ‘okso’, np. ‘hydroksyl’, ‘metoksyl’, ‘epoksyd’, w systematycznych nazwach ‘tlenek’ zastępujemy terminem ‘oksyd’, np. oksyd trifenylofosfiny.

5° W systematycznych nazwach określenie ‘bezwodnik’ zastępujemy terminem ‘anhydryd’ , np. anhydryd octowo propionowy.

6° Wrostki ‘nad’ i ‘pod’ zastąpione są, odpowiednio, wrostkami ‘per’ i ‘hypo’.

Należy przypomnieć, że nazwy grup acylowych kwasów mających nazwy zwyczajowe tworzy się z nazw w języku angielskim. Np. ‘acetyl’. ‘oksalil’, ‘benzoil’. Dotyczy to również kwasów nieorganicznych. Np. ‘sulfuryl’, ’ nitrozyl’.

Zachowane jest konsekwentne stosowanie od dawna eufonicznego ‘o’ i możliwość używania wrostka ‘il’ lub ‘yl’ w zależności od liter, po których występują.

---

[1] Akronim: MAximum number of NonCUmulative DoublE bonds.

[2] Bierzemy pod uwagę możliwość nie robienia wyjątków i zachowania form rzeczownikowych również w nazwach klasowo-funkcyjnych, np. keton etylu metylu, eter dietylu.

GLOSARIUSZ

Amplifikacja (Amplification) W nomenklaturze fanów operacja przywrócenia pierścieni lub układów pierścieni na miejsce superatomów reprezentujących je w nazwie szkieletu fanu.

Amplifikant (Amplificant) Pierścień lub układ pierścieni zastępujący superatom(y) w operacji amplifikacji w nomenklaturze fanów.

Atom peryferyjny (Peripheral atom) Atom w jednym z zewnętrznych pierścieni skondensowanego układu pierścieniowego, który nie jest ani atomem skondensowania ani atomem wewnętrznym.

Atom przyczółkowy (Bridgehead atom) W alicyklicznym układzie pierścieniowym von Baeyera dowolny atom szkieletu układu pierścieniowego związany z trzema lub większą liczbą atomów szkieletu (z wyłączeniem atomów wodoru). W mostkowych skondensowanych układach pierścieniowych atom układu skondensowanego, do którego dołączony jest mostek.

Atom skondensowania (Fusion atom) Wspólny dla dwóch lub większej liczby pierścieni atom skondensowanego układu pierścieniowego

Atom wewnętrzny (Interior atom) Atom skondensowanego układu pierścieniowego, który nie jest ani atomem obwodowym ani atomem przyczółkowym.

Dołączony składnik (Attached compound) Pierścień lub układ pierścieniowy skondensowany z macierzystym składnikiem w nomenklaturze skondensowanej; może być dołączonym składnikiem pierwszego rzędu, np. ‘benzo’ w benzo[g]chinolinie czy ‘furo’ i ‘pirolo’ w furo[3,2-*h*]pirolo[3,4-*a*]-karbazolu, a także dołączonym składnikiem drugiego rzędu, np. ‘cyklopenta’ w cyklopenta[4,5-pirolo[2,3-*c*]pirydynie i ‘pirano’ w pirano[3′,2′:4,5]cyklohep-ta[1,2-*d*]oksepinie i tak dalej.

Funkcjonalny związek macierzysty (Functional parent compound) Struktura, której nazwa zawiera lub sugeruje obecność jednej lub większej liczby grup charakterystycznych i o jednym lub większej liczbie podstawialnych atomów wodoru przyłączonych do co najmniej jednego atomu szkieletu, lub taka, w której jedna z grup charakterystycznych może tworzyć co najmniej jeden rodzaj modyfikacji funkcjonalnej, na przykład kwas octowy, anilina i kwas fosfonowy.

Główna grupa charakterystyczna (Principal characteristic group) Grupa charakterystyczna wybrana do wymieniania na końcu nazwy w postaci przyrostka lub nazwy klasy lub implikowana przez nazwę zwyczajową, na przykład etanol i kwas octowy.

Grupa charakterystyczna (Characteristic grup) Pojedynczy heteroatom, taki jak –Cl i =O; heteroatom związany z jednym lub większą liczbą atomów wodoru bądź innych heteroatomów, takie jak $–NH_2$, -OH, $-SO_3H$, $-PO_3H_2$ i $–IO_2$; a także heteroatomowa grupa związana z lub zawierająca pojedynczy atom węgla, na przykład –CHO, -CN, -COOH i –NCO związana z macierzystym wodorkiem.

Heteroamina (Heteroamine) Związek z grupą aminową związana z heteroatomem, na przykład piperydyno-1-amina.

Heteroatom (Heteroatom) W nomenklaturze związków organicznych, atom inny niż atom węgla, należący do grup 13, 14, 15, 16 i 17, na przykład N, Si i Ge.

Heteroimina (Heteroimine) Związek z grupa iminową połączona wiązaniem podwójnym z heteroatomem, na przykład metylofosfanoimina.

Heterol (Heterol) Związek z grupa hydroksylową połączoną z heteroatomem, na przykład piperydyn-1-ol.

Heteron (Heterone) Związek z atomem tlenu połączony wiązaniem podwójnym z heteroatomem, na przykład metylosilanon.

Keton (Ketone) Związek zawierający atom tlenu połączony wiązaniem podwójnym z atomem węgla, który z kolei jest związany z dwoma atomami węgla, na przykład propan-2-on (CH_3-CO-CH_3).

Kompleksowy podstawnik (Complex substituent group) Podstawnik zawierający prosty podstawnik (macierzysty podstawnik) połączony z podstawnikiem złożonym, na przykład (chlorometylo)fenyl ($ClCH_2$-C_6H_4-).

Macierzysta struktura (Parent structure) Macierzysty wodorek, np. metan, funkcjonalny związek macierzysty, na przykład fenol, sfunkcjonalizowany związek macierzysty, na przykład propan-2-on.

Macierzysty podstawnik (Parent substituent grup) Prosty podstawnik połączony z macierzystym wodorkiem lub macierzystą strukturą w zespolonym podstawniku, na przykład grupa etylowa w $ClCH_2$-CH_2-.

Macierzysty szkielet fanu (Phane parent skeleton) W nomenklaturze fanów rysunek szkieletu przed operacją uproszczenia i po operacji amplifikacji.

Macierzysty wodorek (Parent hydride) Nierozgałęziona acykliczna, cykliczna lub acykliczna/cykliczna struktura, mająca systematyczną lub zachowaną nazwę, i z którą połączone są tylko atomy wodoru, na przykład metan, cykloheksan, styren i pirydyna.

Mostek (Bridge) W alicyklicznym układzie pierścieniowym von Baeyera nierozgałęziony łańcuch atomów, atom lub wiązanie walencyjne łączące dwa atomy przyczółkowe; w mostkowym skondensowanym układzie pierścieniowym mostek może być atomem lub grupą atomów, na przykład etano, azano i epoksireno.

Nazwa Hantzscha-Widmana (Hantzsch-Widman name)**.** Nazwa heteromonocyklicznego pierścienia, zawierającego od trzech do dziesięciu atomów i utworzona według pierwotnej propozycji Hantzscha i Widmana, według której przedrostek bądź przedrostki określające heteroatom(y) w pierścieniu dodaje się do nazwy rdzenia określającej wielkość i stopień nasycenia pierścienia, na przykład 1,2,4-triazol i 1,2-oksazol.

Nazwa semi-systematyczna lub pół-zwyczajowa (Semi-systematic or semi-trivial name) Nazwa, której tylko część jest używana w sensie systematycznym, np. metan, but-2-en i chalkon.

Nazwa systematyczna (Systematic name) Nazwa złożona całkowicie ze specjalnie stworzonych lub wybranych sylab z lub bez liczbowych przedrostków i innych strukturalnych symboli i zbudowana zgodna z regułami systematycznej nomenklatury, na przykład cyklopropanokarbonitryl i 2-chloroetan-1-ol.

Nazwa zwyczajowa (Trivial name) Nazwa, której żadnej części nie nazywa się w sensie systematycznym, na przykład ksantofil.

Nierozłączny przedrostek (Nondetachable prefix) Przedrostek modyfikujący strukturę wymieniany przed nazwą macierzystej struktury po wymienionych alfabetycznie rozłącznych przedrostkach i rozłącznych przedrostkach hydro i/lub dehydro, na przykład, bicyklo, spiro, aza, nor.

Nomenklatura heteranów (Heterane nomenclature) Zasady, reguły i konwencje nomenklatury podstawnikowej zastosowane do macierzystych wodorków pierwiastków grup 13, 14, 15, 16 i 17, innych niż węgiel, na przykład disulfan, triarsan, disilan i boran.

Nomenklatura karbanowa (Carbane nomenclature) Zasady, reguły i konwencje nomenklatury podstawnikowej zastosowanej do macierzystych wodorków węgla, prowadzącej do nazw takich jak metanoamina i cykloheksanol.

Nomenklatura klasowo-funkcyjna (Functional-class nomenclature) Nomenklatura, w której główną grupę charakterystyczną określa nazwa klasy, taka jak chlorek, alkohol lub keton, pisana jako oddzielny wyraz przed nazwą macierzystego wodorku, na przykład jodek metylu, keton etylowo-metylowy, lub nazwa podstawnika, np. chlorek acetylu.

Nomenklatura multiplikacyjna (Multiplicative nomenclature) Nomenklatura pozwalająca nazwać dwa lub większą liczbę identycznych macierzystych wodorków lub heterocyklicznych struktur macierzystych związanych z di- lub poliwalencyjnym podstawnikiem, na przykład 1,1′-peroksydibenzen, kwas 4,4′-oksydi(cykloheksano-1-karboksylowy).

Nomenklatura podstawnikowa (Substitutive nomenclature) Sposób tworzenia nazw związku polegający na wymianie jednego lub większej liczby atomów wodoru ich macierzystego wodorku lub macierzystej struktury, z wyjątkiem atomów wodoru przy atomie chalkogenu, na inny atom lub grupę atomów określanych właściwym dla nich przyrostkiem bądź przedrostkiem, na przykład 1-metylonaftalen i pentan-1-ol.

Nomenklatura skondensowana (Fusion nomenclature) Sposób tworzenia nazywy bi- i policyklicznych układów z dwoma lub większą liczbą pierścieni połączonych ze sobą dwoma przyległymi wspólnymi atomami, na przykład benzo[*g*]chinolina i cyklopenta[*a*]naftalen.

Nomenklatura spiranowa (Spiro nomenclature) Sposób tworzenia nazw układów policyklicznych z co najmniej jedną jednostką spiro wykorzystującym nomenklaturę monospiranowych związków bicyklicznych opracowaną przez Adolfa von Baeyera, np. spiro[4.5]dekan.

Nomenklatura von Baeyera (von Baeyer nomenclature) Sposób tworzenia nazw układów policyklicznych oparty na regułach nazywania bicyklicznych alifatycznych pierścieni stworzony przez Adolfa von Baeyera i rozszerzony na policykliczne układy pierścieniowe, na przykład bicyklo[3.2.1]oktan.

Nomenklatura zamienna ‘a’ szkieletu (Skeletal replacement ‘a’ nomenclature) Sposób tworzenia nazwy oparty na wymianie na heteroatom atomu szkieletu homogenicznego macierzystego wodorku, na przykład 8-tia-2,4,6-trisiladekan i 1,2-dikarba-*closo*-dodecaboran(12). Jest to podgrupa nomenklatury zamiennej opisanej poprzednio.

Nomenklatura zamienna funkcji (Functional replacement nomenclature) Metoda nadawania nazwy, zgodnie z którą atomy tlenu grupy charakterystycznej i funkcjonalnego związku macierzystego zastępowane są atomami halogenu, chalkogenu i/lub atomami azotu, na przykład propano-1-tiol i kwas karbonoimidowy. Jest to podgrupa nomenklatury zamiennej, opisanej poniżej.

Nomenklatura zamienna (Replacement nomenclature) Sposób tworzenia nazw polegający na wymianie jednego atomu, innego niż atom wodoru, lub grupy atomów na inny atom, inny niż atom wodoru, lub grupę atomów, na przykład $6\lambda^5$-fosfaspiro[4.5]dekan i kwas fosforotiowy. Zamiana szkieletu, która będzie opisana poniżej, i nomenklatura zamienna funkcji opisana poprzednio są podgrupami nomenklatury zamiennej.

Ogólna nomenklatura (IUPAC) [(General (IUPAC) nomenclature)] Zasady, reguły i konwencje wedle których tworzy się nazwy inne niż preferowane nazwy IUPAC (PIN), na przykład aceton, propano-1,3-sultim i tioacetamid.

Operacja addycji (Additive operation) Procedura obejmująca formalne zbudowanie struktury z jej części składowych bez utraty żadnych atomów ani grup, np. chlorek wapnia, tlenek styrenu, 1,1-bifenyl, pentyloksy, dekahydronaftalen, pirydyn-1-ium.

Operacja subtrakcji (Subtractive operation) Sposób opisu usuwania atomu, jonu lub grupy wskazywanych w nazwie. Stosuje się przedrostki, przyrostki i końcówki, na przykład 3-norlabdan, propan-2-yl, heks-2-en.

Podstawnik (Substituent) Atom lub grupa zajmujące miejsce podstawialnego atomu wodoru macierzystego wodorku lub macierzystej struktury, na przykład amino, sulfanyl i metyl.

Podstawowy lokant (Primary lokant) W nomenklaturze fanów cyfra arabska oznaczająca atom lub amplifikant w macierzystym szkielecie fanu. W zespołach pierścieni podstawowe lokanty określają pierścienie lub układy pierścieniowe przy numerowaniu struktury.

Pomocniczy macierzysty podstawnik (Subsidiary parent substituent group) Macierzysty podstawnik przyłączony do głównego podstawnika połączonego z macierzystym wodorkiem lub macierzystą strukturą, na przykład w nazwie kompleksowego podstawnika (2-chloroetylo)fenyl, Cl**CH_2-CH_2**-C_6H_4-, grupa etylowa jest pomocniczym macierzystym podstawnikiem a fenyl podstawnikiem macierzystym.

Powiązany podstawnik (Concatenated substituent group) Związek lub kompleksowy podstawnik utworzony wyłącznie w wyniku operacji addycji, na przykład sulfanyloksy (HS-O-) i cykloheksyloksy (C_6H_{11}-CO-).

Preferowana nazwa IUPAC (PIN) [(Preferred IUPAC name (PIN)] Nazwa preferowana spośród dwóch lub więcej nazw utworzonych według dwóch lub więcej zaleceń IUPAC, w tym wielu synonimów ugruntowanych i stosowanych przez lata, na przykład kwas disililooctowy i kwas 3-chloropropanowy.

Prosty podstawnik (Simple substituent group) Podstawnik, którego nazwa składa się z pojedynczej części opisującej atom lub grupę atomów jako jednostkę, np. metyl (-CH_3), hydroksyl (-OH), imino (=NH) i propan-2-yl [$(CH_3)_2$CH-].

Prosty (Simple) Termin opisujący pojedynczy podstawowy element, prosty podstawnik składający się tylko z jednej części opisującej atom lub grupę atomów jako jednostkę, na przykład metyl ($-CH_3$), hydroksyl (-OH), nitryl (-N<) i propan-2-yl [$(CH_3)_2CH-$]. W mostkowych nazwach skondensowanych atom lub grupa opisane jako pojedyncza jednostka są prostymi mostkami, na przykład epoksy, butano, i fosfeno.

Przedrostek amplifikacji (Amplification prefix) Nazwy amplifikantów odtworzonych z superatomów wymienianych jako nierozłączne przedrostki w nazwie macierzystego fanu, np. benzena i pirydyna.

Przedrostek rozłączny (Detachable prefix) Przedrostek dla podstawnika wymieniany przed nazwą struktury macierzystej, i z wyjątkiem przedrostków hydro/dehydro, podlegający alfabetyzacji, na przykład amino, metyl i silil.

Pseudoester (Pseudoester) Związek o ogólnym wzorze R-E(=O)$_x$(OZ) i jego chalkogenowe analogi, gdzie x = 1 lub 2 a Z nie jest atomem węgla ale atomem pierwiastka spośród następującej listy: B, Al, In, Ga, Tl, Si, Ge, Sn, Pb, N(cykliczny), P, As, Sb, Bi, na przykład octan sililu.

Pseudoketon (Pseudoketone) Cykliczny związek posiadający grupę karbonylową połączona z jednym lub dwoma heteroatomami szkieletu bądź z jednym atomem węgla i jednym heteroatomem szkieletu, z wyłączeniem atomów azotu i halogenów, bżdź z heteroatomem należącym do pierścienia lub układu pierścieniowego, na przykład piperydyn-2-on i 1-sililoetan-1-on.

Sfunkcjonowalizowany macierzysty wodorek (Functionalized parent hydride) Macierzysty wodorek zawierający grupę charakterystyczną opisywaną przyrostkiem, na przykład cyklopentanokarbonitryl.

Składnik macierzysty (Parent component) Macierzystym składnikiem układu skondensowanego jest pierścień lub układ pierścieniowy o najwyższym starszeństwie według porządku starszeństwa pierścieni i układów pierścieniowych, na przykład oksepin w dibenzo[*c,e*]oksepin.

Superatom (Superatom) W uproszczonym szkielecie układu fanowego jest to atom pojawiający się w wyniku uproszczenia pierścieni lub układów pierścieni.

Uogólniona nomenklatura 'an' (Generalized 'ane' nomenclature) Zasady, reguły i konwencje nomenklatury podstawnikowej zastosowane generalnie do macierzystych wodorków pierwiastków grup 13, 14, 15, 16 i 17, na przykład sulfan, diazan, trisilan i boran.

Uproszczenie (Simplification) W nomenklaturze fanów operacja prowadząca do uproszczenia szkieletu w wyniku skondensowania pierścienia lub układu pierścieniowego do pojedynczego atomu, nazywanego superatomem.

Wstępnie wybrana nazwa (Preselected name) Nazwa wybrana dla nie-węglowej (nieorganicznej) struktury która ma być użyta jako podstawa do utworzenia preferowanej nazwy IUPAC w nomenklaturze związków organicznych, na przykład hydrazyna i disulfan.

Zachowana nazwa (Retained name) Tradycyjna lub potoczna nazwa stosowana albo jako preferowana nazwa IUPAC albo jako alternatywna nazwa w ogólnej nomenklaturze, na przykład aceton i anilina.

Zespolony podstawnik (Compound substituent group) Podstawnik złożony z dwóch części: (1) prostego podstawnika (macierzystego podstawnika) i (2) jednego lub więcej podstawiających atomów lub grup, na przykład chlorometyl ($ClCH_2$-), hydroksysulfanyl (HO-S-), 2,2-dichloroetyl (Cl_2CH-CH_2-).

Złożony lokant (Composite locant) Lokant złożony z dwóch lub więcej części. W nomenklaturze fanów złożone lokanty składają się z podstawowego numeru identyfikującego każdy amplifikant i górnego indeksu będącego lokantem samego amplifikantu, np. 1^1 i 1^2. W zespołach pierścieni złożone lokanty składają się z pisanego arabskimi cyframi podstawowego numeru identyfikującego każdy układ pierścieniowy i arabskiego górnego indeksu podającego numerowanie pierścienia lub układu pierścieniowego, na przykład 1^1 i 2^1.

Związek macierzysty (Parent compound) często stosowany zamiast struktury macierzystej; (patrz Macierzysta struktura)

ROZDZIAŁ P-1. OGÓLNE ZASADY, REGUŁY I KONWENCJE

P-10 Wprowadzenie
P-11 Zakres nomenklatury związków organicznych
P-12 Preferowane, wstępnie wybrane i zachowane nazwy IUPAC
P-13 Operacje w nomenklaturze związków organicznych
P-14 Ogólne zasady
P-15 Rodzaje nomenklatury
P-16 Pisownia nazw

P-10 WPROWADZENIE

Dla celów nomenklatury, za związek organiczny uważa się strukturę zawierającą co najmniej jeden atom węgla i nie zawierającą pierwiastków z grup 1-12, którą można nazwać stosując zasady opisanych w tym opracowaniu organicznych nomenklatur takich jak podstawnikowa czy zamienna.

Tworzenie nazwy systematycznej związku organicznego wymaga wyboru i nazwania jego struktury macierzystej. Nazwę struktury macierzystej można następnie modyfikować przedrostkami i wrostkami, a w przypadku macierzystego wodorku przyrostkami, które precyzyjnie przekazują jej przekształcenia niezbędne dla utworzenia nazwy zamierzonej. Przeciwieństwem tworzonych w ten sposób nazw systematycznych są nazwy zwyczajowe, szeroko używane w przemyśle i w kołach akademickich, na przykład kwas octowy, benzen czy pirydyna. Zachowuje się je, jeśli spełniają wymagania użyteczności i odpowiadają ogólnemu standardowi nomenklatury systematycznej.

W tych Zaleceniach została opracowana główna oraz systematycznie stosowana nowa zasada ‘preferowanej nazwy IUPAC’ (PIN). Do chwili obecnej nomenklatura opracowana i zalecana przez IUPAC kładła nacisk na tworzenie jednoznacznych nazw w zgodzie z jej rozwojem historycznym. W roku 1993 na skutek gwałtownie rosnącego obiegu informacji i globalizacji ludzkiej aktywności uznano za konieczne posiadanie wspólnego języka , który okaże się ważny w sprawach prawnych, patentowych, w regulacjach importowo-eksportowych w tematyce związanej ze zdrowiem, środowiskiem, informacjach o bezpieczeństwie itd. Z też tego powodu zamiast tworzyć pojedyncze nazwy dla każdej struktury zalecono zastosowanie opracowanych przez nas reguł przypisywania ‘preferowanych nazw IUPAC’; jednocześnie uznajemy za celowe pozostawienie nazw alternatywnych zachowujących różnorodność i możliwość przystosowania nomenklatury do codziennych aktywności w chemii i ogólnie w nauce.

W ten sposób istnienie preferowanych nazw IUPAC nie przeszkadza w używaniu innych nazw uwzględniających specyficzny kontekst lub dla podkreślenia cech strukturalnych wspólnych dla określonej grupy związków. Preferowane nazwy IUPAC (PIN) należą do ‘**preferowanej nomenklatury IUPAC**’. Każda nazwa inna niż preferowana nazwa IUPAC, tak długo jak jest jednoznaczna i zgodna z zasadami zaleceń IUPAC jest akceptowana jako ‘ogólna nazwa IUPAC’ w kontekście ‘**ogólnej nomenklatury IUPAC**’.

Koncepcję preferowanych nazw IUPAC należy traktować jako wkład do stałej ewolucji IUPAC-owskiej nomenklatury związków organicznych. Zawarte w tym opracowaniu zalecenia (Zalecenia 2013) pokrywają i rozszerzają reguły i konwencje opisane w dwóch poprzednich publikacjach, *Nomenklaturze Związków Organicznych*, wydanie 1979 (1) i P*rzewodniku do nomenklatury związków organicznych. Zalecenia 1993* (2). W kilku przypadkach reguły z 1979 r. i zalecenia z 1993 r. zostały zmodyfikowane w taki sposób, aby osiągnąć spójność całego systemu. W przypadku rozbieżności między różnymi zestawami reguł, priorytet mają obecne zalecenia z 2013 roku.

P-11 ZAKRES NOMENKLATURY ZWIĄZKÓW ORGANICZNYCH

Dla celów nomenklatury wszystkie związki zawierające atomy węgla zalicza się do związków organicznych, jak opisano powyżej (P-10). Tlen, wodór i azot są trzema pierwiastkami, zwykle powiązanymi z węglem, dla utworzenia systemu grup funkcyjnych oraz charakterystycznych. Inne pierwiastki, między innymi halogeny i siarka, zamykają podstawowy zestaw pierwiastków występujących w związkach organicznych. Nomenklatura podstawnikowa stosowana była początkowo do nadawania nazw związkom zawierającym ten zestaw pierwiastków. Jej powodzenie spowodowało rozszerzenie tej nomenklatury na wszystkie pierwiastki grup 14, 15, 16 i 17 a także na bor z grupy 13; może być także ona rozszerzona na wszystkie pierwiastki z grupy 13.

Tabela 1.1 Pierwiastki uwzględnione w tych zaleceniach

Grupa	13	14	15	16	17
	B bor	C węgiel	N azot	O tlen	F fluor
	Al glin	Si krzem	P fosfor	S siarka	Cl chlor
	Ga gal	Ge german	As arsen	Se selen	Br Brom
	In ind	Sn cyna	Sb antymon	Te tellur	I jod
	Tl tal	Pb ołów	Bi bizmut	Po polon	At astat

Pierwiastki Al, Ga, In, Tl dodano do pierwiastków zalecanych w wydaniu z 1979 r. (1) i w Przewodniku z 1993 r.(2).

Końcówkę ‘an’ charakterystyczną dla alkanów zapożyczono od metanu, etanu itd. i dodano do określeń tworząc rdzenie nazw wodorków różnych pierwiastków, na przykład sulfan H_2S, fosfan PH_3, silan SiH_4, aluman AlH_3. Powstałe nazwy tworzą podstawy nomenklatury podstawnikowej; takie podejście do macierzystych wodorków nazywane jest **uogólnioną nomenklaturą** ‘**anu**’ ponieważ wszystkie reguły mające zastosowanie do alkanów dają się zastosować do wszystkich wodorków pierwiastków z grup 13, 14, 15, 16 i 17. Nomenklatura wodorków węgla może być wygodnie nazywana ‘**nomenklaturą karbanową**’, a termin ‘**nomenklatura heteranowa**’ obejmuje wodorki pierwiastków innych niż węgiel. Nazwy mononuklearnych macierzystych wodorków podane są w Tabeli 2.1 w Rozdziale P-2.

Związki metaloorganiczne, to jest związki, w których jeden lub więcej atomów węgla jest bezpośrednio związanych z atomem metalu, dla celów nomenklaturowych zalicza się do związków organicznych. Asocjacja ta utrzymuje się w tych zaleceniach (reguła P-69) dla metali, semimetali, i niemetali występujących w grupach 13, 14, 15, 16 i 17. Jednakże nomenklaturę innych organicznych pochodnych pierwiastków z grup 1 – 12 jest uważa się za część nomenklatury związków nieorganicznych.

Podobnie, nazwy preferowane przez IUPAC dla polimerów oraz produktów naturalnych i związków pochodnych wykracza poza zakres tego opracowania. Nazewnictwo polimerów

opracowane będzie we współpracy z Komitetem Polimerów do Terminologii Polimerów, a nomenklatura produktów naturalnych we Wspólnej Komisji Nomenklatury Biochemicznej IUPAC-IUB.

Tworzenie nazw systematycznych opiera się na ogólnych operacjach nomenklaturowych i regułach oraz na operacjach i regułach specyficznych dla różnych typów nomenklatury. Aspekty te będą dyskutowane w kolejnych rozdziałach.

P-12. PREFEROWANE, WSTĘPNIE WYBRANE I ZACHOWANE NAZWY IUPAC

P-12.1 Preferowane nazwy IUPAC
P-12.2 Wstępnie wybrane nazwy
P-12.3 Zachowane nazwy IUPAC
P-12.4 Metodologia

P-12.1 PREFEROWANE NAZWY IUPAC

Preferowanymi nazwami IUPAC są nazwy struktur lub składników struktur wybieranych spośród dwóch lub więcej nazw tej samej struktury utworzonych według dwóch lub więcej reguł dla związków organicznych zalecanych przez IUPAC lub spośród wielu synonimów nagromadzonych i używanych przez lata.

Wybór preferowanych nazw IUPAC, w skrócie PIN, podporządkowany jest zestawom zasad, konwencji i reguł podanych w niniejszym dokumencie. Wszystkie one pochodzą ze ścisłego stosowania reguł i w tym sensie można nazwać je ‘jedynymi nazwami’. Wszystkie nazwy preferowane przez IUPAC identyfikuje się umieszczonym za nimi akronimem (PIN). Nazwy używane w przeszłości, a obecnie albo usunięte albo już nie zalecane, umieszcza się w nawiasie poprzedzonym słowem ‘nie’. Za nazwami związków organicznych zawierających glin, gal, ind lub tal nie umieszcza się skrótu (PIN) ponieważ jeszcze nie podjęto decyzji czy związki te nazywać zgodnie z zasadami organicznymi czy nieorganicznymi.

W wielu przypadkach w tworzeniu nazw związków organicznych konieczny jest wybór preferowanej alternatywy. Preferowane nazwy IUPAC nadaje się macierzystym strukturom; grupy charakterystyczne wskazywane przedrostkami i przyrostkami użyte w PINach nazywa się preferowanymi przedrostkami i przyrostkami. Zależą one również od rodzaju stosowanej nomenklatury, na przykład nomenklatury łączonej, nomenklatury klasowo-funkcyjnej i nomenklatury multiplikacyjnej; a także od różnych typów operacji, na przykład podstawienia, addycji i subtrakcji.

Najczęściej **struktura macierzysta** jest **macierzystym wodorkiem,** to jest strukturą zawierającą, oprócz jednego lub większej liczby atomów wodoru pojedynczy atom pierwiastka, na przykład metan; kilka atomów (takich samych lub różnych) połączonych razem w nierozgałęziony łańcuch, np. pentan; albo monocykliczny bądź policykliczny układ pierścieni, na przykład cykloheksan i chinolina. Metan jest nazwą zachowaną (patrz P-12.3) preferowaną względem systematycznej nazwy ‘karban’; nigdy nie rekomendowanej do zastąpienia metanu, ale stosowanej do tworzenia nazw ‘karben’ i ‘karbyn’, odpowiednio dla rodników $H_2C^{2\cdot}$ i $HC^{3\cdot}$. Podobnie, zachowane nazwy ‘etan’, ‘propan’ i ‘butan’ nigdy nie były zastępowane systematycznymi nazwami ‘dikarban’, ‘trikarban’ i ‘tetrakarban’ jak jest to zalecane dla analogów silanu, ‘disilan’, fosfanu ‘trifosfan’ i sulfonu ‘tetrasulfan’. Nazwa ‘pentan’ powstaje przez zastosowanie P-21.2.1 i jest oznaczona jako preferowana nazwa IUPAC (lub PIN) chociaż nie wymieniono żadnej reguły pozwalającej na utworzenie nazwy alternatywnej. Ta sama argumentacja odnosi się do cykloheksanu, z reguły P-21.2.1 wynika nazwa IUPAC. Zachowana nazwa ‘chinolina’ jest

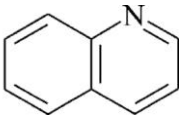
preferowana względem alternatywnych nazw skondensowania ‘1-benzopirydyna’ lub ‘benzo[*b*]pirydyna’.

Przykłady:

CH_4 metan (preferowana nazwa IUPAC lub PIN, nazwa zachowana)
karban

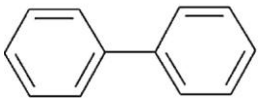
CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-CH_3 pentan (preferowana nazwa IUPAC lub PIN)

cykloheksan (PIN)

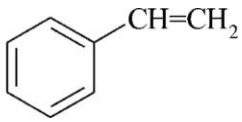


chinolina (PIN, nazwa zachowana P-25.2.1)
1-benzopirydyna (P-25.2.2.4)
benzo[*b*]pirydyna (P-25.3.1.3)
(nie 1-benzazyna, patrz P-22.2.2.1.1)

Czasem wygodnie jest wykorzystać macierzyste wodorki o bardziej złożonych strukturach, takich jak pierścień lub zespoły pierścień-łańcuch, na przykład bifenyl i styren. Nazwa ‘1,1′-bifenyl’ wynika z zastosowania reguły P-28.2.1; stanowi ona preferowaną nazwę IUPAC a lokanty ‘1,1′’ są tu konieczne; nazwę ‘bifenyl’ bez lokantów można stosować w ogólnej nomenklaturze IUPAC. Nazwa ‘styren’ jest nazwą zachowaną i akceptowaną w ogólnej nomenklaturze IUPAC jako jasna i jednoznaczna, wraz z nazwami podstawnikowymi ‘winylobenzen’, ‘fenyloeten’ i ‘fenyloetylen’. Preferowaną nazwą IUPAC (PIN) jest ‘etenylobenzen’.



1,1′-bifenyl (PIN)
bifenyl



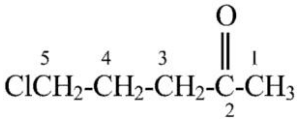
styren (nazwa zachowana; P- 31.1.3.4)
winylobenzen
etenylobenzen (PIN, P-31.1.3.4)
fenyloetan
fenyloetylen

Szczególną grupę struktur macierzystych o zachowanych nazwach (patrz P-12.3) określa się jako funkcjonalne związki macierzyste, na przykład fenol i kwas octowy. Obie te nazwy są preferowane przez IUPAC; odpowiadające im systematyczne alternatywy benzenol i kwas etanowy mogą być używane w ogólnej nomenklaturze IUPAC. Z drugiej strony, chociaż aceton jest zachowaną nazwą rekomendowaną dla ogólnej nomenklatury, to preferowaną przez IUPAC jest nazwa podstawnikowa propan-2-on.

Przykłady:

C_6H_5-OH	CH_3-COOH	CH_3-CO-CH_3
fenol (PIN)	kwas octowy (PIN)	aceton
benzenol	kwas etanowy	propan-2-on (PIN)

Aby utworzyć strukturę macierzystą związku, który zamierza się nazwać, należy przeprowadzić różne operacje formalne. Na przykład, aby nazwać strukturę przedstawioną poniżej, nazwę jej macierzystego wodorku ‘pentan’ tworzy się przez zastąpienie atomów tlenu i chloru odpowiednią liczbą atomów wodoru. Następnie odwraca się tę operację, przyrostek ‘on’ i przedrostek ‘chloro’ wskazujące podstawienie atomów wodoru w pentanie, łączy się z nazwą macierzystego wodorku uzyskując nazwę ‘5-chloropentan-2-on’.



Przedrostki i przyrostki reprezentować mogą wiele różnych formalnych operacji dokonywanych na macierzystej strukturze. Często przyrostek lub przedrostek oznacza dołączenie grupy charakterystycznej (grupy funkcyjnej), na przykład ‘on’ lub ‘okso’ dla =O. Przedrostek może też wskazywać grupę wywodząca się z macierzystego wodorku, na przykład ‘pentyl’, CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2- z pentanu.

Operacja podstawienia opisana w P-13.1 jest operacją najczęściej stosowaną w nomenklaturze organicznej. Wszechstronny system nomenklatury oparty głównie na jej zastosowaniu do macierzystych struktur, dla wygody nazywa się **nomenklaturą podstawnikową**, chociaż obejmuje również inne rodzaje operacji opisane w P-13. Nomenklatura podstawnikowa jest zestawem **podstawnikowych nazw**, **zasad, konwencji i reguł tworzenia nazwy**.

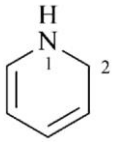
Przykłady operacji podstawnikowych i innych pokazane są w Tabeli 1.2

Tabela 1.2 Operacje nomenklaturowe

CH_3-CH_2-O-CH_2-CH_2-CH_3 CH_3-CHCl-CH_2-CO-CH_3 $P(OCH_3)_3$

1 **2** **3**

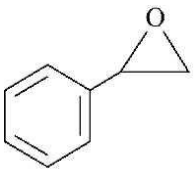
4



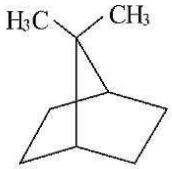
5

CH_3-O-CH_2-CH_2-O-CH_2-CH_2-O-CH_2-O-CH_2-CH_3

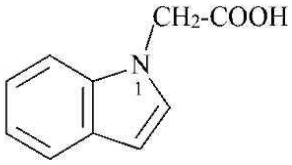
6



7



8



9

Wzór	Struktura macierzysta (nazwa klasy)	Operacja	Nazwa	Odnośnik
1	propan (PIN) (eter)	podstawienie klasa funkcyjna	1-etoksypropan (PIN) eter etylowo-propylowy	P-13.1 P-13.3.3.2
2	pentan (PIN) (keton)	podstawienie klasa funkcyjna	4-chloropentan-2-on (PIN) keton 2-chloropropylowo-metylowy	P-13.1 P-13.3.3.2
3	fosfan (nazwa wstępnie wybrana) (fosforyn)	podstawienie klasa funkcyjna	trimetoksyfosfan fosforyn trimetylu (PIN)	P-13.1 P-13.3.3.2
4	cykloheksan (PIN)	subtrakcja	cykloheksen (PIN)	P-31.1.3.1
5	pirydyna	addycja	1,2-dihydropirydyna (PIN)	P-31.2.3.1
6	etan (PIN) tridekan (PIN)	podstawienie zamiana ‘a’ szkieletu	1-etoksy-2-[2-(metoksyetoksy)etoksy]etan 2,5,8,11-tetraoksatridekan (PIN)	P-13.1 P-13.2.1.1
7	oksiran (PIN) styren + tlenek	podstawienie addycja	2-fenylooksiran (PIN) tlenek styrenu	P-13.1 P-13.3.3.1
8	bornan bicyklo[2.2.1]heptan (PIN)	subtrakcja podstawienie	10-norbornan 7,7-dimetylobicyklo[2.2.1]heptan (PIN)	P-13.4.3.2 P-13.1
9	kwas octowy kwas octowy + indol	podstawienie łączenie	kwas (1*H*-indol-1-ilo)octowy (PIN) kwas 1*H*-indolo-1-octowy	P-13.1 P-13.5.2

Inny rodzaj nomenklatury wskazuje główną grupę charakterystyczną nie w przyrostku nazwy, ale jako oddzielne słowo oznaczające klasę funkcyjną; w Tabeli 1.2 nazwa ‘eter etylowo-propylowy’ jest typową nazwą klasowo-funkcyjną opartą na nazwie klasy funkcyjnej ‘eter’. Odpowiednia nazwa podstawnikowa ‘1-etoksypropan’ zbudowana jest z przedrostka ‘etoksy’ i z nazwy macierzystego wodorku ‘propan’.

Nazwy podstawnikowe i grupowo-funkcyjne zapisuje się w różny sposób. Zazwyczaj, nazwy podstawnikowe są jednolitymi nazwami łączącymi w jednym wyrazie przedrostki, nazwę

macierzystego wodorku, końcówki i przyrostki. W nazwach grupowo-funkcyjnych, przeciwnie, nazwę klasy funkcyjnej podaje się jako osobny wyraz, natomiast część opisująca macierzysty wodorek lub modyfikowany macierzysty wodorek jest wynikiem takich samych operacji jak w nomenklaturze podstawnikowej.

Znakomita większość, jeśli nie wszystkie związki organiczne można nazwać zgodnie z regułami operacji podstawienia i operacji klasowo-funkcyjnej. Jednak w tych zaleceniach, jeśli istnieje wybór, preferowanymi nazwami IUPAC są nazwy utworzone za pomocą operacji podstawienia. W Tabeli 1.2 przykłady 1, 2 i 3 ilustrują tą preferencję. Nazwy podstawnikowe, 1-etoksypropan i 4-chloropentan-2-on są preferowane względem nazw klasowo-funkcyjnych wywodzących się z nazw odpowiednich klas, eteru i ketonu, eter etylowo-propylowy i keton 2-chloropropylowo-metylowy. Natomiast nazwa klasowo-funkcyjna 'fosforyn trimetylu' jest preferowana względem nazwy podstawnikowej trimetoksyfosfan. Estry, halogenki kwasowe, bezwodniki, aminy i tlenki związków azotowych nazywa się preferencyjnie przy zastosowaniu nomenklatury klasowo-funkcyjnej; nomenklatura podstawnikowa jest tu mniej preferowana. Również inne rodzaje operacji są stosuje się szeroko, samodzielnie lub wspólnie z nomenklaturą podstawnikową. Możliwe są dwa główne rodzaje operacji zamiany, operacja zamiany szkieletu (często nazywana nomenklaturą zamienną szkieletu lub po prostu nomenklaturą 'a' i operacja zamiany funkcji. Pierwszą z nich stosuje się jako konieczne uzupełnienie do wprowadzania heteroatomów do węglowodorów pierścieniowych i w celu uniknięcia bardzo skomplikowanych przedrostków w nazwach układów łańcuchowych. Na przykład nazwę '2,5,8,11-tetraoksatridekan' utworzoną przez zamianę szkieletu preferuje się względem nazwy podstawnikowej '1-etoksy-2-[2-(metoksyetoksy)etoksy]etan' (patrz Tabela 1.2, przykład 6). Drugą operację zamiany stosuje się do utworzenia wielkiej liczby przyrostków i przedrostków z podstawowych nazw związków tlenowych. Operacje addycji i subtrakcji rozszerzono do nazywania rodników i jonów. Są one jednocześnie jedyną metodą modyfikacji stopnia uwodornienia w wyniku addycji lub subtrakcji par atomów wodoru. Ilustracje tej metodologii stanowią przykłady 4 i 5. Operacja łączenia eliminuje atomy wodoru z dwóch różnych struktur macierzystych i następnie łączy je; operację tą stosuje się do nazywania macierzystych wodorków złożonych z powtarzających się identycznych elementów lub, w szczególnych okolicznościach, do łączenia pierścieni i łańcuchów. Przykład 9 w Tabeli 1.2 ilustruje taką operację; jednakże w nomenklaturze IUPAC nazwą podstawnikowa jest zawsze preferowana względem nazwy łączonej, na przykład 'kwas (1*H*-indol-1-ilo)octowy' jest preferowany względem 'kwas 1*H*-indolo-1-octowy' (patrz P-51.1.2).

Nomenklatura obejmuje główne operacje wspólnie z zasadami, konwencjami i regułami koniecznymi to tworzenia nazw różnych typów. Dotychczas dyskutowano nomenklaturę podstawnikową i nomenklaturę klasowo-funkcyjną. Nomenklatura zamienna i nomenklatura łączona również wymagają specyficznych zasad, konwencji i reguł. Zupełnie odwrotnie, operacje addycji i subtrakcji nie mają własnych nomenklatur, ale są koniecznym dodatkiem do innych nomenklatur.

Bardzo ważne jest, aby zdawać sobie sprawę, że reguły nomenklatury związków organicznych pisane są w zasadzie dla związków o klasycznych wiązaniach walencyjnych. Zasady i ogólne reguły takiej nomenklatury opisane są w tym rozdziale. Nomenklatura podstawnikowa opisana zostanie w rozdziale P-2 (nazwy macierzystych wodorków), w rozdziale P-3 (końcówki, przyrostki i przedrostki) i w rozdziale P-4 (reguły wyboru struktur macierzystych i unikalnych nazw). W rozdziale P-6 zostały opisane sposoby nazywania związków podzielonych na klasy i grupy nawiązujące do Tablicy Okresowej (grupy 13 - 17). Rozdział P-7 dyskutuje nomenklaturę rodników, jonów i pokrewnych rodzajów. Rozdział P-8 opisuje izotopowe modyfikacje związków organicznych. Rozdział 9 dotyczy opisu konfiguracji i konformacji a rozdział 10 zajmuje się produktami naturalnymi. W rozdziale 10 nie ustalono preferowanych nazw IUPAC (PIN) dla związków naturalnych. Chociaż generalnie większość nazw jest w rzeczywistości akceptowana to istnieje mglisty szary obszar gdzie nie zdefiniowano rozróżnienia między nazwą produktu naturalnego a nazwą systematyczną opartą wyłącznie na zasadach nomenklatury organicznej.

Uporządkowanie tego stanu rzeczy będzie prawdopodobnie zadaniem przyszłościowego projektu dla osób zajmujących się nomenklaturą organiczna i biochemiczną.

Kilka tematów dyskutowanych w tych zaleceniach było opublikowanych po 1993 r. jako w pełni wszechstronne dokumenty: rodniki i jony (3), skondensowane i mostkowe układy pierścieni skondensowanych (4), nomenklatura fanów (5,6), system von Baeyera dla związków policyklicznych (7), związki spiranowe (8) , produkty naturalne (9) i fullereny (10,11). Nie są one cytowane *in extenso* w tych zaleceniach. Zamiast tego, istniejące zasady, konwencje i reguły zostały przedyskutowane obecnie mniej wyczerpująco. Aby poradzić sobie z bardziej skomplikowanymi przypadkami czytelnicy powinni skorzystać z pełnych publikacji; te zalecenia nie zastępują oryginalnych publikacji chyba że jest to wyróżnione podaniem uwag w ramkach. Jeszcze raz podkreślamy, że wszystkie zmiany w stosunku do poprzednich zaleceń wprowadzone dla zapewnienia logiczności są wyraźnie zaznaczone i zastępują wszystkie poprzednie reguły i interpretacje.

W obecnym opracowaniu etykietkę 'PIN' dodaje się do nazw związków, których macierzyste wodorki zawierają co najmniej jeden z pierwiastków: Ge, Sn, Pb, As, Sb, Bi i co najmniej jeden atom węgla oraz które można nazwać stosując nomenklaturę podstawnikową lub jedną ze zbliżonych nomenklatur zgodnie z zasadami podanymi w tych zaleceniach.

Reguły wyboru preferowanej nazwy IUPAC (PIN) dla związków zawierających Al, Ga, In, Tl a także C, B, Si, Ge, Sn, Pb, N, P, As, Sb, Bi, O, S, Se, Te, Po, F, Cl, Br, I, At i nie zawierających atomów węgla lub takich, które nie mogą być nazwane na podstawie przestawionej tu nomenklatury organicznej, będą dyskutowane w późniejszych publikacjach. W obecnych zaleceniach dyskutowane są przykłady ilustrujące zakres i ograniczenia nomenklatury podstawnikowej rozszerzonej od atomów węgla do wszystkich pierwiastków z grup 13 – 17; oznaczenie 'wstępnie wybrana' nazwa dodano do właściwych nazw.

P-12.2 WSTĘPNIE WYBRANE NAZWY

Nazwami wstępnie wybranymi są nazwy struktur lub ich składników wybranych spośród dwóch lub większej liczby nazw nie zawierających atomów węgla (nieorganicznych) ich prekursorów, które służyć mają za podstawę preferowanych nazw IUPAC dla związków organicznych w nomenklaturze związków organicznych.

Jeśli chodzi o podstawnikową nomenklaturę organiczną, to aby nazwać pochodne zawierające atomy węgla najpierw musimy wybrać nazwy dla macierzystych wodorków lub innych struktur macierzystych nie zawierających węgla. Nazwy wybrane do tych celów nazywamy 'wstępnie wybranymi'.

Każdą nie zawierającą atomów węgla strukturę macierzystą, którą można podstawiać lub funkcjonalizować stosując grupy zawierające atomy węgla określa się jako unikalną 'wstępnie wybraną' i stanowi ona podstawę do tworzenia nazw preferowanych przez IUPAC; nie zawierające atomów węgla grupy charakterystyczne, przedrostki i przyrostki używane w PIN nazywa się wstępnie wybranymi przedrostkami i przyrostkami.

Nazwy struktur macierzystych, przedrostków i przyrostków określane tutaj jako 'wstępnie wybrane' niekoniecznie będą preferowanymi nazwami IUPC w kontekście nieorganicznej nomenklatury chemicznej.

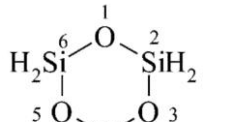
Wszystkie nazwy w Tabeli 2.1, z wyjątkiem metanu (karbanu) są nazwami wstępnie wybranymi i pojęcie to ilustrują następujące przykłady.

Przykłady:

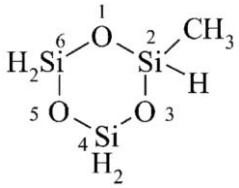
SnH_3-$[SnH_2]_{11}$-SnH_3	tridekastannan (nazwa wstępnie wybrana)
CH_3- SnH_2-$[SnH_2]_{11}$-SnH_3	1-metylotridekastannan (PIN)

$(HO)_3PO$ $(CH_3O)_3PO$

kwas fosforowy (nazwa wstępnie wybrana) fosforan trimetylu (PIN)



1,3,5,2,4,6-trioksatrisilinan (nazwa wstępnie wybrana; patrz P-22.2.2.1.6)
cyklotrisiloksan (P-22.2.6)



2-metylo-1,3,5,2,4,6-trioksatrisilinan (PIN)

P-12.3 NAZWY ZACHOWANE

Nazwy zachowane to tradycyjne lub potoczne, dobrze ugruntowane nazwy, które mogą być albo nazwami preferowanymi przez IUPAC, takimi jak naftalen, pirydyna i kwas octowy, albo wstępnie wybranymi, takimi jak hydrazyna i hydroksyloamina; lub alternatywnymi dopuszczalnymi w ogólnej nomenklaturze, na przykład allen.

P-12.4 METODOLOGIA

W opracowaniu tym nazwy struktur macierzystych, grup charakterystycznych i ich przedrostków oraz związków organicznych są systematycznie identyfikowane jako preferowane przez IUPAC nazwy, przedrostki i przyrostki; albo jako wstępnie wybrane nazwy, przedrostki i przyrostki. Preferowane przez IUPAC deskryptory stereochemiczne opisano i zastosowano w rozdziale P-9. Dla ułatwienia tworzenia nazw związków organicznych, preferowane i wstępnie wybrane przedrostki właściwe dla tworzenia preferowanych nazw IUPAC podane są w Załączniku 2 wspólnie z innymi przedrostkami dopuszczalnymi w ogólnej nomenklaturze.

P-13 OPERACJE W NOMENKLATURZE ZWIĄZKÓW ORGANICZNYCH

Wszystkie operacje opisane w tym rozdziale obejmują modyfikacje strukturalne i są dzielone najpierw zależnie od rodzaju modyfikacji, na przykład ‘zamiana’ a następnie zależnie od drogi realizaci tej operacji, na przykład ‘przez użycie wrostków zamiennych’. Struktury poddawane różnym modyfikacjom można uważać za struktury macierzyste, a modyfikacje wyrażać przyrostkami, afiksami, wrostkami i przedrostkami lub zmianami końcówek.

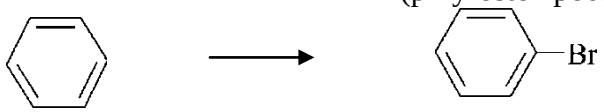
P-13.1 Operacja podstawienia
P-13.2 Operacja zamiany
P-13.3 Operacja addycji
P-13.4 Operacja subtrakcji
P-13.5 Operacja łączenia
P-13.6 Operacja multiplikacji
P-13.7 Operacja kondensacji
P-13.8 Operacje stosowane wyłącznie w nomenklaturze produktów naturalnych

P-13.1 OPERACJA PODSTAWIENIA

Operacja podstawienia polega na wymianie jednego lub większej liczby atomów wodoru na inny atom lub grupę. Proces ten wyraża się przyrostkiem lub przedrostkiem określającym wprowadzany atom czy grupę.

CH_3-CH_3 ⟶ CH_3-CH_2-SH

etan (PIN) — etanotiol (PIN)
(przyrostek podstawnikowy = ‘tiol’)



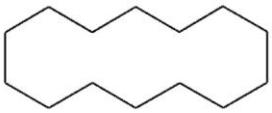
benzen (PIN) — bromobenzen (PIN)
(przedrostek podstawnikowy = ‘bromo’)

P-13.2 OPERACJA ZAMIANY

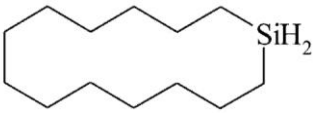
P-13.2.1 Operacja zamiany polega na wymianie jednej grupy atomów lub pojedynczego atomu, różnego od wodoru, na inny. Można to wyrazić na kilka sposobów, co pokazano w kolejnych podrozdziałach.

P-13.2.1.1 Stosując zamienne przedrostki (‘a’) reprezentujące wprowadzony pierwiastek. Ten rodzaj zamiany nazywa się ‘zamianą szkieletu’. Najbardziej popularnym rodzajem zamiany w chemii związków organicznych jest wymiana atomu węgla na jeden lub większą liczbę atomów następujących pierwiastków: O, S, Se, Te, N, P, As, Sb. Bi, Si, Ge, Sn, Pb.

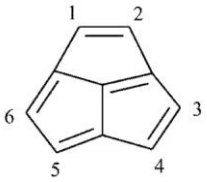
Przykłady:



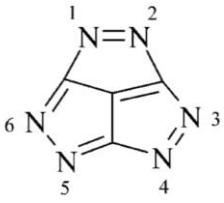
cyklotetradekan (PIN)



silacyklotetradekan (PIN)



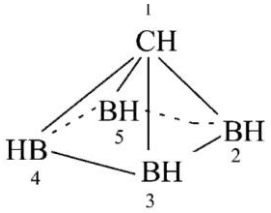
cyklopenta[*cd*]pentalen (PIN)



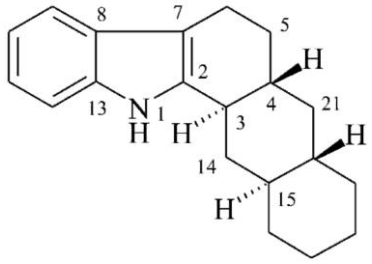
[przedrostek zamienny (‘a’) = sila]
1,2,3,4,5,6-hexaazacyklopenta[*cd*]pentalen
[przedrostek zamienny (‘a’) = aza]

P-13.2.1.2 W specjalnych warunkach, heteroatom może być zastąpiony przez atom węgla lub przez inny heteroatom. Pierwszą możliwość ilustruje przykład z nomenklatury cyklicznych poliboranów (patrz IR-6.2.4.4.12), obie można znaleźć w nomenklaturze produktów naturalnych (patrz RF-5, 9 i P-101.4), a należy je stosować tylko jeśli istnieją specjalne zalecenia, ponieważ standardowo nomenklatura związków organicznych opiera się na atomach węgla.

Przykłady:



1-karba-*nido*-pentaboran(5) (PIN)
[przedrostek zamienny (‘a’) = karba; węgiel zastępuje bor: patrz P-68.1.1.2.1]



4β*H*-4-karbajochimban
[przedrostek zamienny (‘a’) = karba; węgiel zastępuje azot: patrz P-101.4]

P–13.2.2 Przedrostkami lub wrostkami wskazującymi zamianę atomów tlenu lub grup zawierających atomy tlenu.

P-13.2.2.1 Ten rodzaj zamiany nazywany jest ‘zamianą funkcji’. Stosuje się tu afiksy reprezentujące wprowadzoną grupę czy grupy. Nomenklatura zamienna funkcji opisana jest w P-15.5.

Przykłady:

$(CH_3)_2P(O)\text{-}OCH_3$ ⟶ $(CH_3)_2P(=NH)\text{-}OCH_3$

dimetylofosfinian metylu (PIN)

P,P-dimetylofosfinoimidan metylu (PIN)
[wrostek zamienny = imid(o); =NH zastępuje =O]
P,P-dimetylo(imidofosfinian) metylu
[wrostek zamienny = imid(o); =NH zastępuje =O]

⟶

$C_6H_5\text{-}P(O)(OH)_2$ $C_6H_5\text{-}P(\equiv N)\text{-}OH$

kwas fenylofosfonowy (PIN)

kwas fenylofosfononitrydowy (PIN)
[wrostek zamienny = ‘nitryd(o)’;
≡N zastępuje zarówno =O jak i OH]
kwas fenylo(nitrydofosfonowy)
[wrostek zamienny = ‘nitryd(o)’;
≡N zastępuje zarówno =O jak i OH]

P-13.2.2.2 Afiksy ‘tio’, ‘‘seleno’ i ‘telluro’ oznaczają zastąpienie atomu tlenu grupy charakterystycznej innym atomem chalkogenowym.

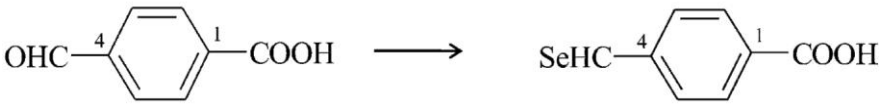
Przykłady:

$C_6H_5\text{-}COOH$ ⟶ $C_6H_5\text{-}C\{O,Se\}H$

kwas benzoesowy — kwas benzenokarboselenowy (PIN)
(wrostek zamienny = ‘‘seleno’;
selen zastępuje albo =O albo -O-)
kwas selenobenzoesowy
(wrostek zamienny = ‘‘seleno’;
selen zastępuje albo =O albo -O-)

CH_3-$[CH_2]_4$-COOH ⟶ CH_3-$[CH_2]_4$-C(S)SH

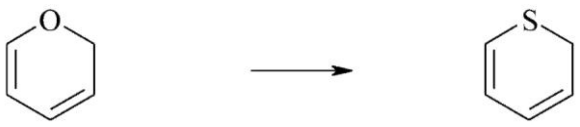
kwas heksanowy (PIN) — kwas heksanoditiowy (PIN)
(wrostek zamienny = ‘ti(o)’;
S zastępuje =O i –O-)
[nie kwas heksano(ditiowy)]



kwas 4-formylobenzoesowy (PIN) — kwas 4-metanoselenoilobenzoesowy (PIN)
kwas 4-(selenoformylo)benzoesowy
(przedrostek zamienny = ‘‘seleno’
=S zastępuje =O)

P-13.2.2.3 W szczególnych przypadkach przedrostki ‘tio’, ‘seleno’ i ‘telluro’ wskazują na modyfikacje szkieletu. Zamiana taka ma miejsce w cyklicznych wodorkach macierzystych o zachowanych nazwach, to jest morfolinie (patrz Tablica 2.3), piranie (patrz Tablica 2.2) chromenie, izochromenie i ksantanie (patrz Tablica 2.8), chromanie i izochromanie (patrz Tablica 3.1).

Przykłady:



2*H*-piran (PIN)
(nie 2*H*-oksin, patrz P-22.2.2.1.1)

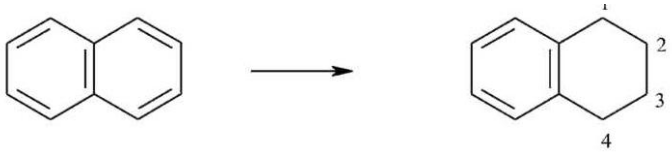
2*H*-tiopiran (PIN)
(przedrostek zamienny = ‘tio’;
S zastępuje O)
2*H*-tiin (nazwa Hantzscha-Widmana, patrz P-22.2.2.1.1.)

P-13.3 OPERACJA ADDYCJI

Operacja addycji polega na formalnym składaniu struktury z elementów, bez utraty atomów i grup. Operację tę można wyrazić na kilka sposobów, jak pokazano w kolejnych podrozdziałach.

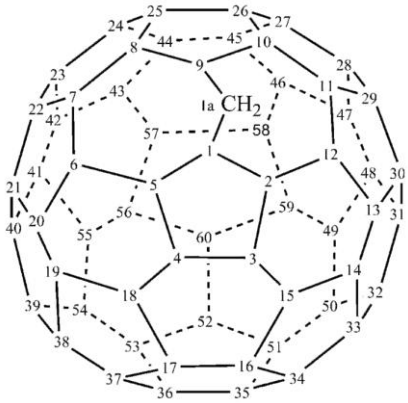
P-13.3.1 Przedrostkiem addytywnym

Przykłady:

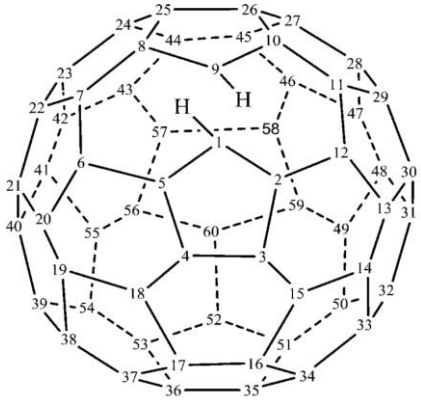


naftalen (PIN) 1,2,3,4-tetrahydronaftalen (PIN)

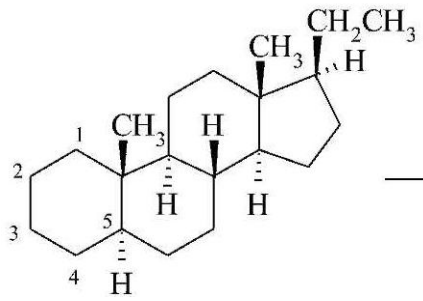
(‘hydro’- przedrostek oznaczający addycję jednego atomu wodoru)



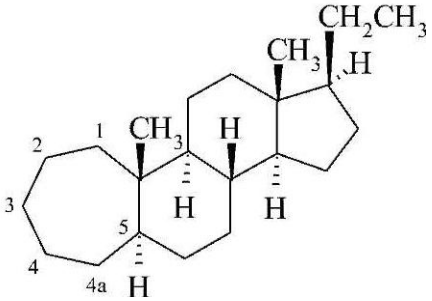
1a*H*-1(9)a-homo(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren (PIN)



1,9-seko(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren (PIN)

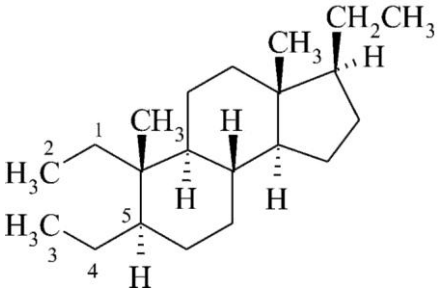


5α-pregnan



4a-homo-5α-pregnan

(‘homo’ = addycja grupy metylenowej która, w tym przypadku, powiększa pierścień, patrz P-101.3.2.1)

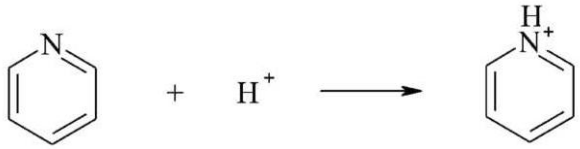


2,3-seko-5α-pregnan

(‘seko’ = addycja dwóch atomów wodoru w pozycje 2 i 3 spowodowała konieczność rozerwania wiązania między C-2 i C-3)

P-13.3.2 Przyrostkiem addytywnym

Przykłady:



pirydyna (PIN) — pirydyn-1-ium (PIN)
(‘ium’ = przyrostek oznaczający addycję jednego H^+)

$CH_3\text{-}BH_2 + H^- \longrightarrow CH_3BH_3^-$

metyloboran — metyloboranuid (PIN)
(‘uid’ = przyrostek oznaczający addycję jednego H^-)

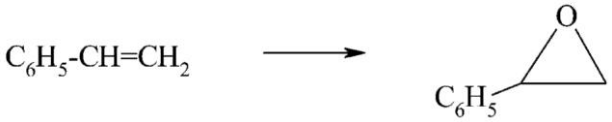
P-13.3.3 Oddzielnym słowem

P-13.3.3.1 Z nazwą obojętnej struktury macierzystej

Przykłady:

$CH_3\text{-}C{\equiv}N \longrightarrow CH_3\text{-}C{\equiv}NO$

acetonitryl (PIN) — oksyd acetonitrylu (PIN)
tlenek acetonitrylu



styren
etenylobenzen (PIN)
→ oksyd styrenu
tlenek styrenu
2-fenylooksiran (PIN)

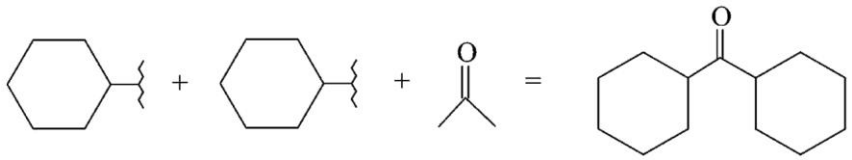
P-13.3.3.2 Z jedną lub większą liczbą nazw przedrostków podstawnikowych.

W tym przypadku oddzielny wyraz jest nazwą klasy lub sub-klasy reprezentującym grupę charakterystyczną lub rodzajem grupy charakterystycznej, do której przyłączone są podstawniki (patrz także nomenklatura klasowo-funkcyjna, P-15.2)

Przykłady:

CH_3^- + OH^- → CH_3OH

metyl (preferowany przedrostek) — alkohol (nazwa klasy) — alkohol metylowy
metanol (PIN)



cykloheksyl (preferowany przedrostek) | cykloheksyl (preferowany przedrostek) | keton (nazwa klasy) | keton dicykloheksylowy dicykloheksylometanon (PIN)

CH_3- + C_6H_5- + $-O-$ ⟶ $CH_3-O-C_6H_5$

metyl (preferowany przedrostek) | fenyl (preferowany przedrostek) | eter (nazwa klasy) | eter metylowo-fenylowy anizol (PIN) metoksybenzen

$C_6H_5-CH_2-$ + CN^- ⟶ $C_6H_5-CH_2-CN$

benzyl (preferowany przedrostek) | cyjanek (nazwa klasy) | cyjanek benzylu fenyloacetonitryl (PIN)

P-13.3.4 Dodając podstawniki, w operacji nazywanej powiązaniem.

Przykłady:

$CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-$ + $-O-$ ⟶ $CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-O-$

pentyl (preferowany przedrostek) | oksy (wstępnie wybrany przedrostek) | petyloksy (preferowany przedrostek)

Cl^- + $-CO-$ ⟶ $Cl-CO-$

chloro (wstępnie wybrany przedrostek) | karbonyl (preferowany przedrostek) | chlorokarbonyl karbonochlorydoil (preferowany przedrostek)

$-NH-$ + $-CH_2-CH_2-$ + $-NH-$ ⟶ $-NH-CH_2-CH_2-NH-$

azanodiyl (wstępnie wybrany przedrostek) | etano-1,2-diyl (preferowany przedrostek) | azanodiyl (wstępnie wybrany przedrostek) | etano-1,2-diylobis(azanodiyl) (preferowany przedrostek)

P-13.3.5 Łącząc jednostki molekularne

Rodzaj chemiczny AB, w którym dwie jednostki molekularne A i B połączone bez utraty atomów nazwać można jako addukty (patrz P-14.8) wymieniając nazwy A i B połączone długim łącznikiem.

Przykłady:

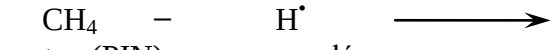
tlenek węgla (PIN) metyloboran (PIN) tlenek węgla –metyloboran (PIN)

P-13.4 OPERACJA SUBTRAKCJI

Operacja subtrakcji obejmuje usunięcie atomu lub grupy zawartych w nazwie. Operacja ta może odbyć się bez innej zmiany, z wprowadzeniem nienasycenia lub z utworzeniem podstawników, rodników lub jonów. W nomenklaturze produktów naturalnych w celu pokazania różnego rodzaju operacji subtraktywnych stosuje się kilka przedrostków. Dalsze podrozdziały pokazują, że subtrakcję pokazać można w różny sposób.

P-13.4.1 Przyrostkiem

Przykłady:



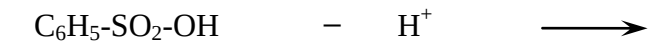
metan (PIN) monowodór (nazwa wstępnie wybrana) metyl (PIN; rodnik; przyrostek ‘yl’ wskazuje utratę jednego atomu wodoru)

etan (PIN) hydron (nazwa wstępnie wybrana) etanid (PIN, anion; przyrostek ‘id’ wskazuje utratę hydronu)

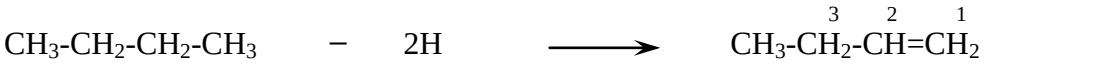
butan (PIN) hydryd (nazwa wstępnie wybrana) butylium (PIN, przyrostek ‘ylium’ wskazuje utratę jonu hydrydu)

P-13.4.2 Przez zmianę końcówki

Przykłady:



kwas benzenosulfonowy (PIN) hydron (nazwa wstępnie wybrana) benzenosulfonian (PIN, końcówka ‘ian’ wskazuje utratę hydronu z kwasu –owego)

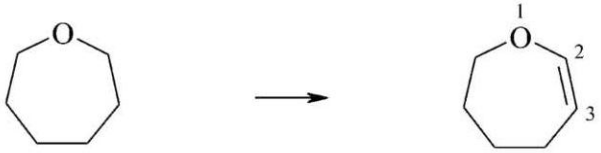


butan (PIN) wodór (nazwa wstępnie wybrana) but-1-en (PIN, końcówka ‘en’ wskazuje stratę dwóch atomów wodoru)

P-13.4.3 Przedrostkiem ‘dehydro’ lub ‘nor’

P-13.4.3.1 Przedrostek ‘dehydro’

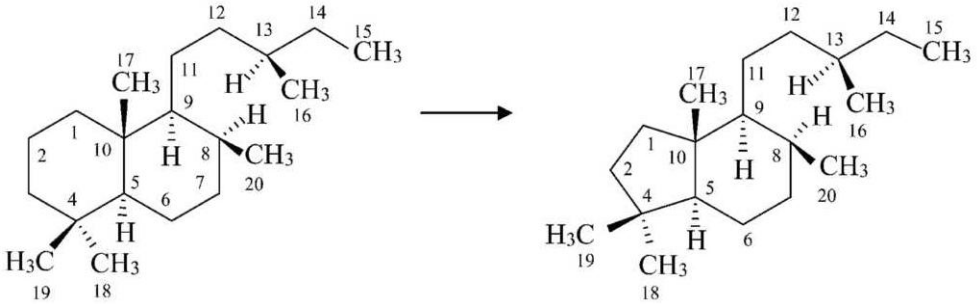
Przykład:



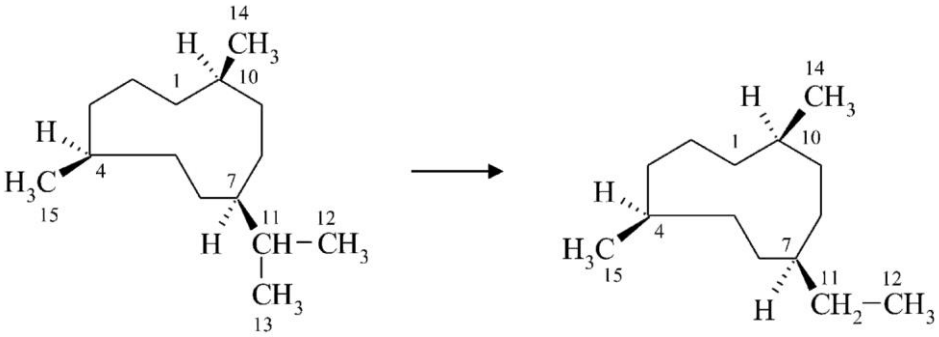
oksepan (PIN) 2,3-didehydrooksepan (przedrostek didehydro wskazuje utratę dwóch atomów wodoru)
2,3,4,5-tetrahydrooksepin (PIN, patrz P-54.4.1)

P-13.4.3.2 Przedrostka ‘nor’ używa się do wskazania usunięcia niepodstawionego nasyconego atomu szkieletu z pierścienia lub łańcucha macierzystej stereostruktury (patrz P-101.3.1) i utraty atomu węgla ze struktury fullerenu (patrz P-27.4.2).

Przykłady:

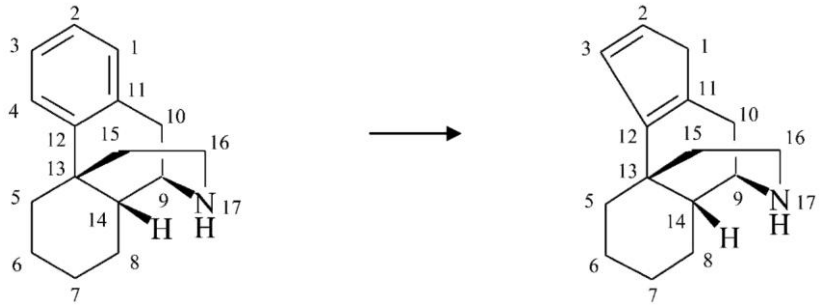


labdan (podstawowa struktura macierzysta) 3-norlabdan (kontrakcja pierścienia w wyniku usunięcia grupy metylenowej –CH_2– z pierścienia)



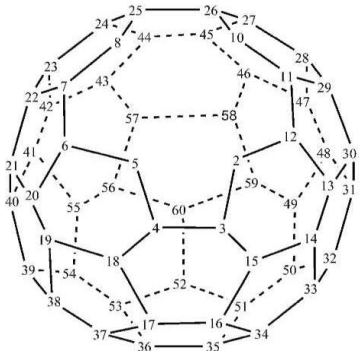
germakran
podstawowa struktura
macierzysta)

13-norgermakran (usunięcie grupy metylenowej –CH_2– z bocznego łańcucha)
(1*R*,4*S*,7*S*)-4-etylo-1,7-dimetylocyklododekan
(patrz P-101.3.1.1)



morfinan
(podstawowa struktura macierzysta)

1*H*-4-normorfinan



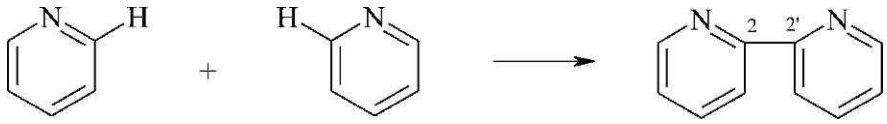
1,9-dinor(C_{60}-I_h)[5,6]-fulleren (PIN)

P-13.5 OPERACJA ŁĄCZENIA

W operacji łączenia nazwę związku, utworzonego formalnie przez usunięcie atomu wodoru z jego składników, tworzy się z nazw tych składników. Operację tę wyraża się jak opisano w kolejnych podrozdziałach.

P-13.5.1 Umieszczając przedrostek zwielokrotniający ‘bi’, ‘ter’, ‘kwater’ itd. (patrz P-14.2.3).

Przykłady:

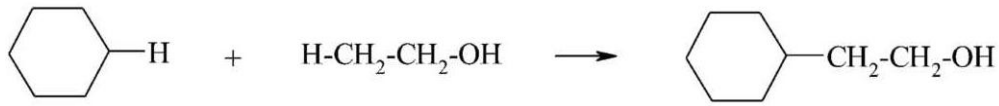


pirydyna (PIN) pirydyna (PIN) 2,2′-bipirydyna (PIN)
2,2′-bipirydyl (patrz P-28.2.1)

P-13.5.2 Zestawiając nazwy składników (nomenklatura łączona)

Metoda ta stosowana jest przez Chemical Abstracts Service. Nie zalecana się jej do tworzenia nazw preferowanych przez IUPAC; zalecaną alternatywą jest nomenklatura podstawnikowa (patrz P-51). Tę metodę stosuje się naczęściej gdy dwoma składnikami, które mają połączyć się są pierścień lub układ pierścieni i łańcuch (lub łańcuchy) podstawione główną grupą charakterystyczną. Zarówno główna grupa charakterystyczna jak i pierścień czy układ pierścieni muszą znajdować się na krańcach łańcucha; jeśli łańcuch ma podstawniki to wskazuje się je przedrostkami podstawnikowymi, których lokantami są greckie litery α, α^1, β, β^1 itd. (α oznacza atom sąsiadujący z główną grupą charakterystyczną).

Przykłady:



cykloheksan (PIN) etanol (PIN) cykloheksanoetanol
2-cykloheksyloetan-1-ol (PIN)

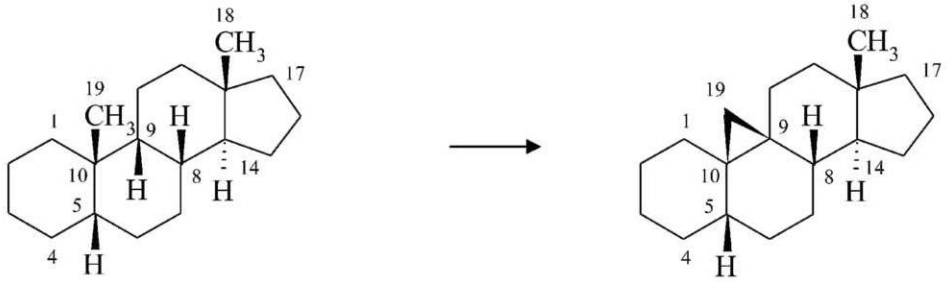
cyklopentan (PIN) kwas cyklopentanooctowy kwas α-etylocyklopentanooctowy
kwas cyklopentylooctowy (PIN) kwas 2-cyklopentylobutanowy (PIN)

P-13.5.3 Tworzenie pierścienia

Tworzenie pierścienia w wyniku bezpośredniego połączenia pomiędzy dwoma atomami struktury macierzystej z utratą jednego atomu wodoru z każdego z tych atomów, wskazuje się przedrostkiem ‘cyklo’.

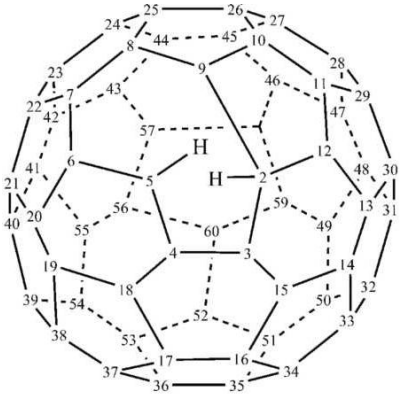
Przykłady:

propan (PIN) cyklopropan (PIN)



5β,9β-androstan
(podstawowa struktura macierzysta)

9,19-cyklo-5β,9β-androstan
(patrz P-101.3.3)



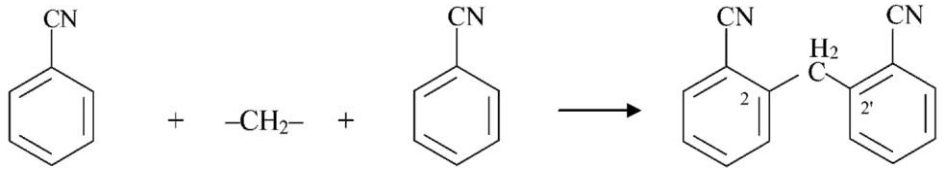
2*H*-2,9-cyklo-1-nor(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren (PIN)

P-13.6 OPERACJA MULTIPLIKACJI

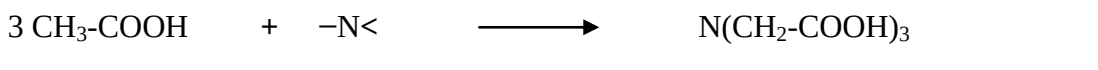
Operacja ta pozwala wyrazić wielokrotność występowania struktur macierzystych połączonych symetryczną wielowiązalną grupą.

P-13.6.1 W nomenklaturze podstawnikowej operację multiplikacji stosuje się do nazywania zespołów identycznych struktur macierzystych połączonych di- lub poliwalencyjnymi grupami. Identyczne struktury macierzyste są sfukcjonowalizowanymi macierzystymi wodorkami, związkami o macierzystych funkcjach, i pierścieniami lub zespołami pierścieni. Jest to w istocie nomenklatura podstawnikowa w której identyczne struktury macierzyste połączone są ze sobą di- lub poliwalencyjną grupą.

Przykłady:



benzonitryl (PIN) + metylen (preferowany przedrostek) + benzonitryl (PIN) → 2,2′-metylenodibenzonitryl (PIN)



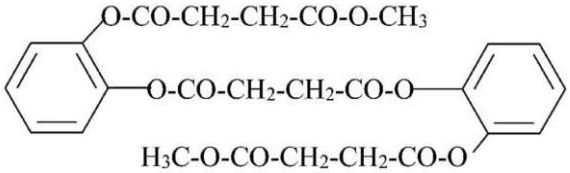
kwas octowy (PIN) nitrylo (wstępnie wybrany przedrostek) kwas 2,2′,2″-nitrylotrioctowy *N*,*N*-bis(karboksymetylo)glicyna (patrz P-103.1, Taela 10.4)

cykloheksan (PIN) oksy (wstępnie wybrany przedrostek) cykloheksan (PIN) 1,1′-oksydicykloheksan (PIN)

P-13.6.2 W nomenklaturze grupowo-funkcyjnej operację multiplikacji stosuje się do nazywania zespołów identycznych struktur macierzystych bi- lub multiwalencyjną nazwą klasy funkcyjnej.

Przykłady:

dipropanodian dimetylu-1,4-fenylenu (PIN)

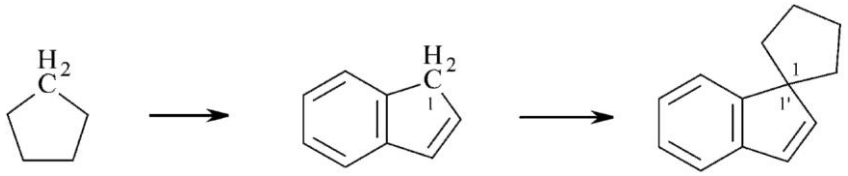


dibutanodian butanodioilobis(oksy-2,1-fenylenu)-dimetylu (PIN)

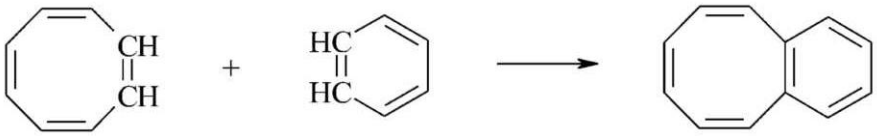
P-13.7 OPERACJA KONDENSACJI

Operacja kondensacji polega na połączeniu dwóch pierścieni lub układów pierścieni w taki sposób, żeby miały one atomy lub atomy i wiązania wspólne. Układy spiro mają jeden atom wspólny; skondensowane układy pierścieniowe mają wspólne dwa atomy.

Przykłady:



cyklopentan (PIN) 1*H*-inden (PIN) spiro[cyklopentano-1,1′-inden] (PIN)



[8]annulen cyklookta-1,3,5,7--tetraen (PIN) benzen (PIN) benzo[8]annulen (PIN) (patrz P-25.3.2.1.1)

P-13.8 OPERACJE UŻYWANE TYLKO W NOMENKLATURZE ZWIĄZKÓW NATURALNYCH

W nomenklaturze związków naturalnych stosuje się kilka przedrostków do wskazywania utraty grupy, to jest zamianę grupy na atom wodoru. Usunięcie elementów wody z jednoczesnym utworzeniem wiązania też można uważać za operację subtrakcji. Operacje te wskazuje się następującymi przedrostkami:

‘abeo’ przegrupowanie pojedynczych wiązań w stereostrukturze macierzystej (patrz P- 101.3.5.1)

‘anhydro’ utrata wody z dwóch grup hydroksylowych z utworzeniem wiązania (patrz P-102.5.6.7)

‘apo’ usunięcie całego bocznego łańcucha w układzie karotenoidowym (P-101.3.4.2)

‘de’ w nomenklaturze węglowodanów –usuniecie atomu tlenu z grupy –OH (patrz P-102.5.3) lub zamiana grupy metylowej na atom wodoru (patrz P-101.3.6)

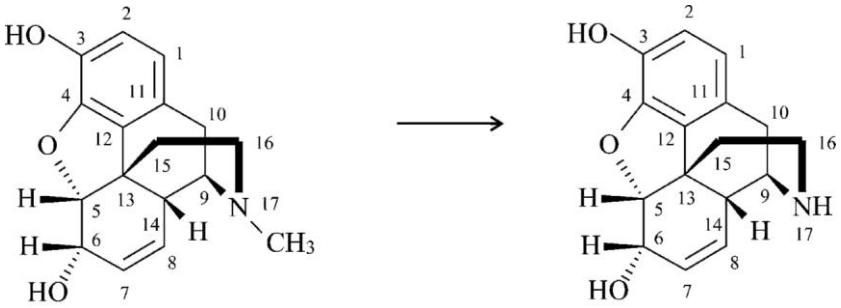
‘des’ usuniecie cząsteczki aminokwasu z peptydu (patrz P-103.3.5.4) lub krańcowego niepodstawionego pierścienia ze szkieletu steroidu (patrz P-101.3.5.2)

‘retro’ przeniesienie podwójnego wiązania w układzie karotenoidowym (patrz P-101.3.5.2)

P-13.8.1 Przedrostkami ‘de’ i ‘des’

P-13.8.1.1 Przedrostek ‘de’ (nie ‘des’) po którym następuje nazwa grupy lub atomu (innego niż wodór) , oznacza usunięcie (lub utratę) tej grupy i dodanie, w razie potrzeby, atomów wodoru, i.e. wymiana tej grupy na atomy wodoru.

Przykłady:



I morfina **II** demetylomorfina (wymiana metylu na H)

I (5β*H*)-17-metylo-7,8-didehydrofuro[2′,3′,4′,5′:4,12,13,5]morfinano-3,6α-diol
4,5α-epoksy-17-metylo-7,8-didehydromorfinano-3,6α-diol

II (5β*H*)-7,8-didehydrofuro[2′,3′,4′,5′:4,12,13,5]morfinano-3,6α-diol
4,5α-epoksy-7,8-didehydromorfinano-3,6α-diol

Jako wyjątek, ‘deoksy’ zastosowane do związków hydroksylowych oznacza usunięcie atomu tlenu z grupy OH z ponownym połączeniem atomu wodoru. ‘Deoksy’ jest szeroko stosowany jako przedrostek subtraktywny w chemii węglowodanów (patrz P-102.5.3).

Przykłady:

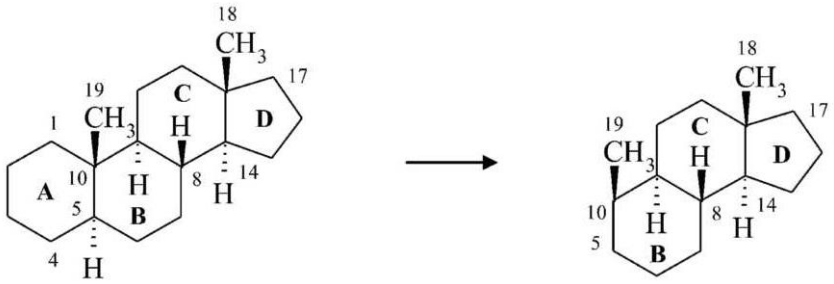
β-D-galaktopiranoza (podstawowa struktura macierzysta)

4-deoksy-β-D-*ksylo*-heksopiranoza (nie 4-deoksy- β-D-galaktopiranoza) (2*R*,3*R*,4*S*,6*S*)-6-(hydroksymetyl)oksano-2,3,4-triol (numerowanie jak dla macierzystego wodorku oksanu)

P-13.8.1.2 Przedrostek ‘des’ oznacza usunięcie reszty aminokwasu z peptydu, z połączeniem na nowo łańcucha (patrz P-103.3.5.4) lub usunięcie krańcowego pierścienia ze stereostruktury macierzystej (patrz P-101.3.6).

Przykład:

oksytocyna (PIN) ⟶ des-7-prolina-oksytocyna (usunięcie reszty proliny z pozyji 7 oksytocyny)



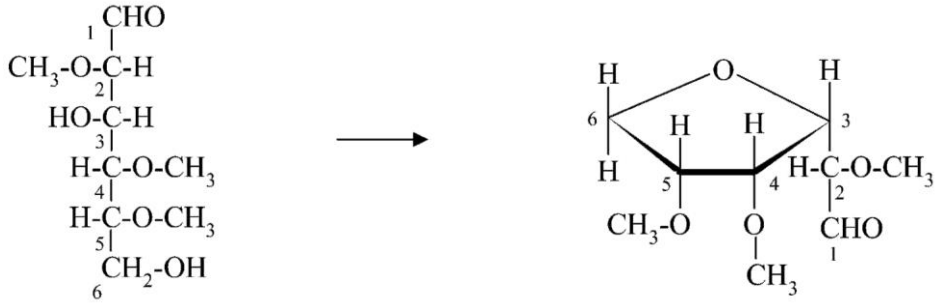
5α-androstan
(podstawowa struktura macierzysta)

des-*A*-androstan (patrz P-101.3.6)
(usunięcie pierścienia A 5α-androstanu)

P-13.8.2 Przedrostkiem anhydro

Wewnątrzcząsteczkowe etery, powstałe formalnie w wyniku eliminacji cząsteczki wody z dwóch grup hydroksylowych pojedynczej cząsteczki (aldozy lub ketozy) lub pochodnej monosacharydowej nazywa się używając rozłączny przedrostek ‘anhydro’ poprzedzony parą lokantów identyfikujących dwie zaangażowane grupy hydroksylowe. Przedrostek ‘anhydro’ umieszcza się w nazwie w kolejności alfabetycznej (patrz P-102.5.6.7.1).

Przykład:



2,4,5-tri-*O*-metylo-D-mannoza
(podstawowa struktura macierzysta)

3,6-anhydro-2,4,5-tri-*O*-metylo-D-mannoza
(przedrostek ‘anhydro’ opisuje usunięcie H_2O z 2 grup OH w tej samej strukturze)

P-14 OGÓLNE REGUŁY

P-14.0 Wprowadzenie
P-14.1 Wiązalność
P-14.2 Przedrostki zwielokrotniające
P-14.3 Lokanty
P-14.4 Numerowanie
P-14.5 Porządek alfanumeryczny
P-14.6 Porzadek nie-alfanumeryczny
P-14.7 Wskazany i ‘dodany wskazany’ atom wodoru
P-14.8 Addukty

P-14.0 WPROWADZENIE

W tym rozdziale opisano reguły mające ogólne zastosowanie w nazywaniu zarówno typów związków jak i poszczególnych związków. Reguły te należy ściśle stosować zarówno przy tworzeniu nazw preferowanych przez IUPAC jak i nazw ogólnego zastosowania.

P-14.1 WIĄZALNOŚĆ

Koncepcja standardowego stanu wiązalności atomu jest podstawową w nomenklaturze organicznej. Ponieważ większość nazw organicznych wywodzi się z formalnej wymiany atomów wodoru struktury macierzystej na inne atomy lub grupy, należy dokładnie wiedzieć ilu atomów wodoru możemy oczekiwac dla szkieletu struktury macierzystej. Na przykład, czy nazwa fosfan to PH_3 czy PH_5? Jest to istotny problem kiedy pierwiastek występować może w więcej niż jednym stanie walencyjnym; w takich przypadkach nie określa się stanu standardowego, ale każdy inny stan walencyjny wskazuje się wymieniając odpowiednią **wiązalność.** Wiecej szczegółów znajduje się w publikacji 'Treatment of Variable Valence in Organic Nomenclature (Lambda Convention) (lit. 13). W tych zaleceniach konwencję tę nazywa się 'λ-konwencją'.

P-14.1.1 Definicje

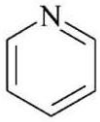
Wiązalność *n* szkieletowego atomu jest sumą łącznej liczby równoważników jego wiązań (wiązań walencyjnych) z sąsiednimi atomami szkieletu w macierzystym wodorku i liczby atomów wodoru.

Przykłady:

H_2S dla S, $n = 2$

H_6S dla S, $n = 6$

$(C_6H_5)_3PH_2$ dla P, $n = 5$



dla N, $n = 3$

P-14.1.2 Standardowe wiązalności. Wiązalność atomu szkieletu uważa się za standardową kiedy ma ona wielkość podaną w Tabeli 1.3

Tabela 1.3 Standardowe wiązalności pierwiastków grup 13, 14, 15, 16 i 17

Standardowa wiązalność (*n*)	**Pierwiastek**				
3	B	Al	Ga	In	Th
4	C	Si	Ge	Sn	Pb
3	N	P	As	Sb	Bi

2	O	S	Se	Te	Po
1	F	Cl	Br	I	At

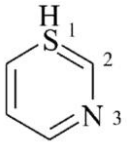
P-14.1.3 Niestandardowa wiązalność

Niestandardowa wiązalność **obojętnego** atomu szkieletu macierzystego wodorku jest wskazywana symbolem λ^n wymienianym w połączeniu z odpowiednim lokantem. Należy zwrócić uwagę że *n* w symbolu λ^n jest pisane kursywą, ale liczby w konkretnym symbolu λ^4 już nie (użycie pisanego kursywą '*n*'z symbolem λ^n jest omówione w 'General rules for symbols in physical quantities, Rozdział 1.3, odn. **14)**

Przykłady:

CH_3-SH_5 $(C_6H_5)_3PH_2$

metylo-λ^6-sulfan (PIN) trifenylo- λ^5-fosfan (PIN)



λ^4,3-tiazyna (PIN)

P-14.2 PRZEDROSTKI MULTIPLIKACYJNE

W nazwach używa się trzech rodzajów przedrostków zwielokrotniających do wskazania wielokrotności identycznych cech strukturalnych (grupy charakterystyczne, podstawniki, wiązania wielokrotne) i odpowiednich afiksów (przyrostki, wrostki i przedrostki). Przedrostki te umieszcza się przed tą częścia nazwy, której dotyczą.

P-14.2.1 Podstawowe przedrostki multiplikacyjne oznaczają proste cechy i w zasadzie są pierwszym wyborem pomiędzy przedrostkami zwielokrotniajacymi (odn. **15**). Wymienione są one w Tabeli 1.4.

Tabela 1.4 Podstawowe terminy numeryczne (przedrostki zwielokrotniające)

Liczba	Określenie liczbowe	Liczba	Określenie liczbowe	Liczba	Określenie liczbowe	Liczba	Określenie liczbowe
1	mono hen	11	undeka	101	henhekta	1001	henkilia
2	di, do	20	ikoza	200	dikta	2000	dilia
3	tri	30	triakonta	300	trikta	3000	trilia
4	tetra	40	tetrakonta	400	tetrakta	4000	tetralia

5	penta	50	tetrakonta	500	pentakta	5000	pentalia
6	heksa	60	pentakonta	600	heksakta	6000	heksalia
7	hepta	70	heptakonta	700	heptakta	7000	heptalia
8	okta	80	oktakonta	800	oktakta	8000	oktalia
9	nona	90	nonakonta	900	nonakta	9000	nonalia
10	deka	100	hekta	1000	kilia		

P-14.2.1.1 Przedrostek mono

P-14.2.1.1.1 Jeśli przedrostek zwielokrotniający występuje sam, to określeniem liczbowym dla liczby ‘1’ jest ‘mono’, a dla ‘2’ – ‘di’. W połączeniu z innymi określeniami liczbowymi, liczba ‘1’ wskazywana jest przez ‘hen’ (z wyjątkiem ‘undeka’) a liczba ‘2’ przez ‘do’ (z wyjątkiem ‘dikta’ i ‘dilia’). Określeniem liczbowym dla ‘11’jest ‘undeka’.

P-14.2.1.1.2 Przedrostka ‘mono’nie używa się w systematycznie tworzonych nazwach do wskazania obecności jednej cechy nomenklaturowej, na przykład przedrostka, przyrostka lub końcówki. Jest on natomiast używany w nomenklaturze grupowo-funkcyjnej do opisu monoestru dikwasu, na przykład ester monometylowy kwasu ftalowego, i w terminologii, dla podkreślenia pojedynczości, na przykład monocykliczny i mononuklearny w przeciwieństwie do bicyklicznego i polinuklearnego.

P-14.2.1.2 Tworzenie pochodnych podstawowych terminów liczbowych

Po ‘undeka’ (jedenaście) złożone terminy liczbowe tworzy się systematycznie wymieniając podstawowe człony w kolejności odwrotnej do cyfr arabskich w liczbowym przedstawieniu numeru. Złożone terminy tworzy się wymieniając kolejno podstawowe człony, bez łączników. Literę ‘i’ w ikoza usuwa się przed samogłoską.

Przykłady:

```
486      heksaoktakontatetracta
         | 6  |    80    | 400  |
```

14	tetrakta	21	henikoza	22	dokoza
23	trikoza	24	tetrakoza	41	hentetrakonta
52	dopentakonta	111	undekahekta	363	triheksakontatrikta

P-14.2.2 Człony liczbowe w nazwach związków o skomplikowanej budowie

Przerostki zwielokrotniające dla związków lub kompleksowych rodzajów, takich jak podstawione podstawniki, tworzy się dodając ‘kis’ do podstawowego przedrostka zwielokrotniającego

kończącego się literą ‘a’: ‘tetrakis’, ‘pentakis’ itd. (odn. **15**). Przedrostki ‘bis’ i ‘tris’ odpowiadają ‘di’ i ‘tri’. Przedrostek ‘mono’nie ma odpowiednika w tej serii.

Przykład:

2	bis	3	tris	4	tetrakis

231 hentriakontadiktakis

P-14.2.3 Przedrostki multiplikacyjne w nazewnictwie zespołów identycznych elementów

Tradycyjne przedrostki stosowane do wskazania liczby powtarzających się identycznych jednostek w nierozgałęzionych zespołach pierścieni (patrz P-28) są następujące:

2	bi	5	kwinkwe	8	okti
3	ter	6	seksi	9	noni
4	kwater	7	septi	10	deci

Lista ta uzupełniona została od 11 do 9999. Przedrostki tworzy się zmieniając końcówkę ‘a’ podstawowego przedrostka liczbowego na ‘i’, na przykład, ‘undeci’ dla 11, ‘heksadeci’ dla 16, ‘tetrakonti’ dla 40.

P-14.3 LOKANTY

P-14.3.1 Rodzaje lokantów

Tradycyjnym rodzajem lokantów są cyfry arabskie, na przykład, 1, 2, 3, primowane lokanty, na przykład 1′, 1′′′, 2′′, lokanty zawierające małe litery, na przykład 3a, 3b, pisane kursywą duże litery, na przykład *O, N, S*, greckie litery, na przykład ‘α-, β-, γ’ i zespolone lokanty, na przykład, ‘1(10)’ i ‘5(17)’.

Nie zaleca się stosowania dalej przedrostków *o, m, p*; zamiast nich w nazwach podstawnikowych należy stosować ‘1,2-‘, ‘1,3-‘ i ‘1,4-’. Wyjątkiem są trzy izomery ksylenu, które w ogólnej nomenklaturze IUPAC można nazywać *o*-, *m*- i *p*-ksylenem (patrz P-22.1.3).

W ostatnich latach dla różnych celów wprowadzono nowe złożone lokanty, na przykład 3^2, $2a^1$, $N^{2'}$ i O^3 i są one uwzględnione w tych zaleceniach. Stosuje się je w nomenklaturze fanów do wskazania pozycji w amplifikantach (patrz P-26.4.3); w numerowaniu zespołów pierścieni (patrz P-28.3); do wskazania wewnętrznych pozycji w skondensowanych układach pierścieni (patrz P-25.3.3.3) i w deskryptorach von Baeyera spiranowych układów pierscieniowych (patrzP-24.2.2). Stosuje się je również w nomenklaturze steroidów (patrz odn. **16** i P- 101.7.1.1), tetrapiroli (odn. **17**) oraz aminokwasów i peptydów (odn. **18**).

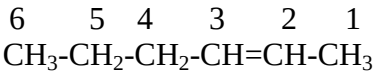
Do rozróżnienia takich samych lokantów w różnych częściach struktury dodaje się primy, na przykład 1′, 2′′, *N*′ i α′. W lokantach składających się z dwóch lub trzech znaków primy dodaje się zazwyczaj do podstawowego znaku. Na przykład w lokantach zawierających małe litery, jak w skondensowanych układach pierścieni, primy dodaje się do liczb, na przykład 3′a i $2'a^1$; sposób ten stosuje się zgodnie z zasadą że w lokantach pozycji skondensowania w skondensowanych układach pierścieni litery nastepują po poprzedzających drugoplanowych lokantach. W złożonych

lokantach stosowanych w nomenklaturze fanów primy dodaje się do lokantu superatomu, jak w $2'^{3}$ i $2'^{4a}$. W nomenklaturze multiplikacyjnej primy mogą pojawić się bezpośrednio po lokancie literowym, jak w N'^{4} lub po złożonym lokancie jak w N^{2}'.

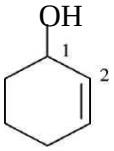
P-14.3.2 Pozycja lokantów

Lokanty (cyfry i/lub litery) umieszcza się bezpośrednio przed częścią nazwy, której dotyczą. Wyjątkiem są skrócone nazwy zwyczajowe, w których lokanty umieszcza się przed nazwą.

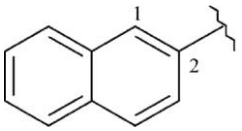
Przykłady:



heks-2-en (PIN)
(nie 2-heksen)



cykloheks-2-en-1-ol
(nie 2-cykloheksen-1-ol)



naftalen-2-yl (preferowany przedrostek)
2-naftyl (nazwa skrócona)
(nie naft-2-yl)

P-14.3.3 Wymienianie lokantów

W nazwach preferowanych przez IUPAC, o ile lokanty są ważne dla zdefiniowania budowy struktury macierzystej lub jednostki strukturalnej zdefiniowanej przez odpowiednie nawiasy, to należy wymienić wszystkie lokanty dla tej struktury macierzystej i tej jednostki strukturalnej. Na przykład opuszczenie lokantu '1' w 2-chloroetanolu jest dopuszczalne w ogólnym użyciu, ale niedopuszczalne w preferowanych nazwach IUPAC, tak więc właściwą nazwą jest tu 2-chloroetan-1-ol (PIN). Natomiast w przykładzie 1-fenylo-2-(fenylodiazenylo)-2-(fenylohydrazynylideno)etan-1-on (PIN) nie zostały użyte lokanty dla jednostek strukturalnych zdefiniowanych nawiasami, są za to lokanty dla tych jednostek jako podstawników struktury macierzystej czyli etanonu. W preferowanych przez IUPAC nazwach multiplikacyjnych i w preferowanych nazwach IUPAC dla zespołów pierścieni lokanty są zawsze wymieniane, na przykład 1,1′-oksydibenzen (P-15.3.1.3) i 1,1′-bifenyl (P-28.2.1).

P-14.3.4 Opuszczanie lokantów

Powszechną praktyką jest opuszczanie lokantów o ile nie spowoduje to niejednoznaczności. Jednakże dla absolutnej klarowności preferowanych nazw IUPAC konieczne są zasady określające kiedy takie opuszczanie jest dopuszczalne. Lokanty opuszcza się w preferowanych nazwach IUPAC w podanych niżej przypadkach.

P-14.3.4.1 Lokantów terminalnych nie wymienia się w nazwach wywodzących się z acyklicznych węglowodorów kwasów mono i dikarboksylowych oraz odpowiadajacych im halogenków kwasowych, amidów, hydrazydów, nitryli, aldehydów, amidyn, amidrazonów, hydrazydyn i amidoksymów, o ile są niepodstawione lub podstawione na atomach węgla.

Przykłady:

$HOOC\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}COOH$	kwas butanodiowy (PIN)
$HOOC\text{-}CH_2\text{-}CH(Cl)\text{-}COOH$	kwas 2-chlorobutanodiowy (PIN)
$CH_3\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}CO\text{-}$	pentanoil (PIN)

H_2N-CO-CH(CH_3)-CO-NH_2 2-metylopropanodiamid (PIN)
CH_3-NH-CO-CH_2-CO-NH-CH_3 N^1,N^3-dimetylopropanodiamid(PIN)
(nie N^1,N^3-dimetylopropano-1,3-diamid)

P-14.3.4.2 Lokant ‘1’ opuszcza się:

(a) w nazwach podstawionych mononuklearnych macierzystych wodorków

Przykłady:

CH_3Cl
chlorometan (PIN)

SiH_2Cl_2
dichlorosilan (od silanu, wstępnie wybranej nazwy)

$(CH_3)_3Al$
trimetyloaluman (PIN)

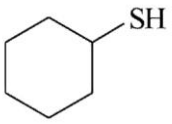
(b) w nazwach monopodstawionych homogenicznych łańcuchów zbudowanych wyłącznie z dwóch identycznych atomów:

CH_3-CH_2-OH
etanol (PIN)

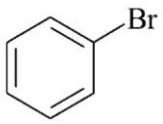
H_2N-NH-Cl
chlorohydrazyna (od hydrazyny, wstępnie wybranej nazwy)

NH_2-NH- hydrazynyl (preferowany przedrostek)
(nie hydrazyn-1-yl)

(c) w nazwach monopodstawionych homogenicznych monocyklicznych pierścieni;



cykloheksanotiol (PIN)



bromobenzen (PIN)

(d) w nazwach niepodstawionych dinuklearnych i trinuklearnych alkenów i alkinów i mono-nienasyconych cykloalenów i cykloalkinów; podobnie w mono-nienasyconych związkach zbudowanych z homogenicznych łańcuchów zawierających pierwiastki z grup 13, 14, 15, 16 i 17 oraz odpowiadające im mono-nienasycone związki pierścieniowe.

Przykłady:

CH_2=CH_2 CH≡CH CH_3-CH=CH_2

eten (PIN) acetylen (PIN) propen (PIN)

NH=NH SiH≡SiH

diazen (nazwa wstępnie wybrana) disilin (nazwa wstępnie wybrana)
H_2N-N=NH triazen (nazwa wstępnie wybrana)

P-14.3.4.3 Lokant usuwa się w nazwach monopodstawionych symetrycznych macierzystych wodorków lub związków macierzystych posiadajacych tylko jeden rodzaj podstawialnych atomów.

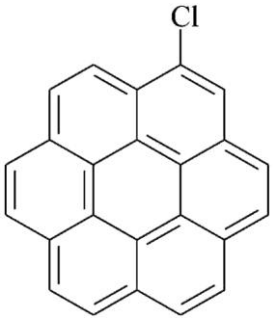
Przykłady:

CH_3-NH-CO-NH_2

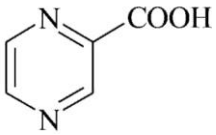
metylomocznik (PIN)

Cl-SiH_2-O-SiH_3

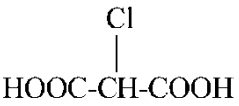
chlorodisiloksan (od disiloksan, nazwa wstępnie wybrana)



chlorokoronen (PIN)



kwas pirazynokarboksylowy (PIN)



kwas chloropropanodiowy (PIN)
kwas chloromalonowy

P-14.3.4.4 Lokanty pomija się, kiedy zmiana pozycji przedrostków i/lub przyrostków bądź wymiana miedzy ich dwoma różnymi pozycjami nie generuje innego izomeru.

Przykłady:

CH_3-CH=N-NH-

etylidenohydrazynyl (preferowany przedrostek)
(nie 2-etylidenohydrazyn-1-yl)

HC≡Si-Si≡C-CH_3

etylidyno(metylidyno)disilan (PIN)
(nie1-etylidyno-2-metylidynodisilan)

C_6H_5-CH=SiH-Si(=CH-C_6H_5)-

dibenzylidenodisilanyl (preferowany przedrostek)
(nie 1,2-dibenzylidenodisilan-1-yl)

H_2C=P-O-PH-O-P=CH-CH_3

etylideno(metylideno)trifosfoksan (PIN)
(nie 1-etylideno-2-metylidenotrifosfoksan)

H $_2$Si=N-NH-Cl

chloro(sililideno)hydrazyna (PIN)
(nie 1-chloro-2-sililidenohydrazyna)

Br-S-S-CH_3

(bromodisulfanylo)metan (PIN)
[nie bromo(methylo)disulfane, patrz P-63.3.1; nie 1-bromo-2-methylodisulfan]

O=C=CH- Cl-N=N-

oksoetenyl (preferowany przedrostek) chlorodiazenyl(preferowany przedrostek)

W podanych poniżej przykładach lokanty są potrzebne.

CH_3-CH_2-CH=SiH-Si(=CH-CH_3)-

1-etylideno-2-propylidenodisilan-1-yl (preferowany przedrostek)
(przez zamianę miejscami dwóch podstawników powstaje inny izomer: 2-etylideno-1-propylidenodisilan-1-yl)

CH_3-$\overset{2}{C}$H=$\overset{1}{S}$iH-SiH_2-Cl

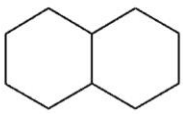
1-chloro-2-etylidenodisilan (PIN)
(przez przesunięcie atomu Cl z pozycji '1' do pozycji '2' z jednoczesną zmianą numeracji atomów krzemu powstaje inny izomer: 1-chloro-1- etylidenodisilan)

Cl-CH=CH- 2-chloroeten-1-yl (preferowany przedrostek)
2-chlorowinyl

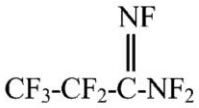
P-14.3.4.5 Pomija się wszystkie lokanty w nazwach związków lub podstawników, w których wszystkie podstawialne pozycje są całkowicie zajęte lub zmodyfikowane, na przykład przez hydro. Z wyjątkiem atomów wodoru połączonych z atomami chalkogenów, tak jak w kwasach, alkoholach i aldehydach, wszystkie atomy wodoru uważa się za podstawialne.

W przypadku częściowego podstawienia lub modyfikacji należy podać wszystkie lokanty.
Nie zaleca się stosowania przedrostka 'per-'.

Przykłady:



dekahydronaftalen (PIN)



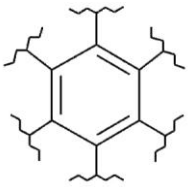
oktafluoropropanoimidoamid (PIN)

$\overset{4}{C}F_3$-$\overset{3}{C}F_2$-$\overset{2}{C}F_2$-$\overset{1}{C}$OOH

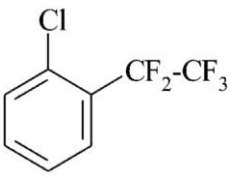
kwas heptafluorobutanowy (PIN)

CF_3-CF_2-CH_2-OH

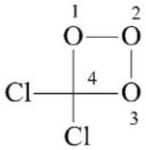
2,2,3,3,3-pentafluoropropan-1-ol (PIN)



benzenoheksail (PIN)



1-chloro-2-(pentafluoroetylo)benzen (PIN)



$F_2N\text{-}CO\text{-}NF_2$

tetrafluoromocznik (PIN)

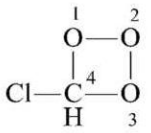
dichlorotrioksetan (PIN)

P-14.3.4.6 W nazwach związków macierzystych z wszystkimi podstawialnymi atomami wodoru o tym samym lokancie opuszcza się wszystkie lokanty.

Przykłady:

$F_2CH\text{-}COOH$

kwas difluorooctowy (PIN)
(nie kwas 2,2-difluorooctowy)



chlorotrioksetan (PIN)
(nie 4-chlorotrioksetan)

P-14.3.5 Najniższy zestaw lokantów

Najniższy zestaw lokantów definiuje się jako zestaw, który porównywany z innymi zestawami, uszeregowanymi od najmniejszego do najwyższego, ma najniższą wartość w pierwszym miejscu różnicy; na przykład zestaw lokantów ‘2,3,5,8’ jest niższy od ‘3,4,6,8’ i ‘2,4,5,7’.

Primowane lokanty umieszcza się bezpośrednio po odpowiadających im lokantach nieprimowanych w zestawie o wzrastającym porządku; lokanty złożone z liczby i litery z lub bez primów jak 4a i 4′a (nie 4a′) umieszcza się bezpośrednio za odpowiadającymi im lokantami liczbowymi, a po nich podaje się lokanty z indeksami górnymi.

Lokanty literowe pisane kursywą są niższe niż lokanty wyrażane literami greckimi, które z kolei sa niższe od lokantów liczbowych.

Przykłady:
2 jest niższe od 2′
3 jest niższe od 3a
8a jest niższe od 8b
4′ jest niższe od 4a
4a jest niższe od 4′a
1^2 jest niższe od 1^3
1^4 jest niższe od 2′
3a jest niższe od 3a’
1,1,1,4,2 jest niższe od 1,1,4,4,2
1,1′,2′,1″,3″,1‴ jest niższe od 1,1′,3′,1″,2″,1‴
N,α,1,2 jest niższe od 1,2,4,6

Uwaga: Istnieje wyjątek w nomenklaturze karotenoidów, w której używa się 5,8,5′,8′ zamiast 5,5′,8,8′ – (patrz P-101.5.2), ten ostatni zestaw lokantów byłby zalecany w systematycznej nomenklaturze podstawnikowej.

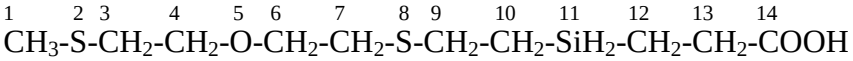
P-14.4 NUMEROWANIE

Kiedy w związkach cyklicznych i acyklicznych występuje kilka cech strukturalnych, niskie lokanty są im przypisywane w podanym niżej malejącym porządku starszeństwa:

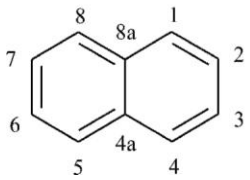
Dwie ważne zmiany w stosunku do zaleceń z 1979 roku (**1**):
(1) heteroatomy w łańcuchach uważa się teraz za część macierzystego wodorku; jako takie mają one pierwszeństwo nad przyrostkami w numerowaniu tak jak heteroatomy w pierścieniach;
(2) przedrostki hydro/dehydro uważa się za rozłączne, ale nie umieszcza się ich w alfabetycznej liście przedrostków rozłącznych; wymienia się je bezposrednio przed nazwą macierzystego wodorku [patrz punkt (e) poniżej)].

(a) Ustalone numerowanie w łańcuchach, pierścieniach i układach pierścieni posiadających taki sposób numerowania, na przykład puryna, antracen i fenantren, takie numerowanie należy stosować zarówno dla PIN jak i w ogólnej nomenklaturze.

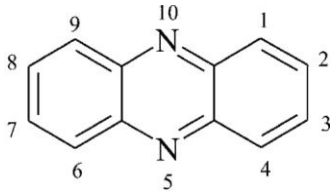
Przykłady:



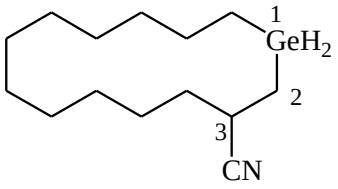
kwas 5-oksa-2,8-ditia-11-silatetradekan-14-owy (PIN)



naftalen (PIN)



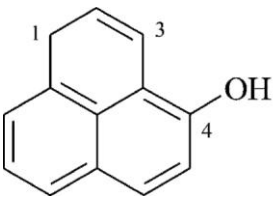
fenazyna (PIN)

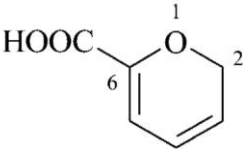


1-germacyklotetradekano-3-karbonitryl (PIN)

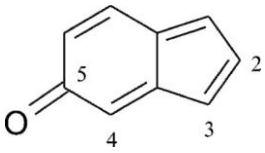
(b) wskazany atom wodoru dla podstawionych związków; wyższy lokant może być wymagany w innej pozycji aby ulokować przyrostek podstawnikowy w zgodzie z cechami strukturalnymi (d);

Przykłady





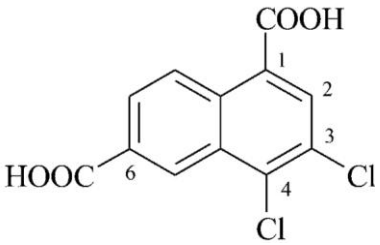
1*H*-fenalen-4-ol (PIN) kwas 2*H*-pirano-6-karboksylowy (PIN)



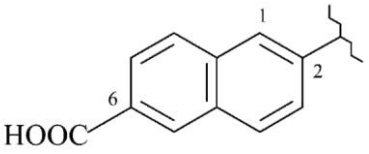
5*H*-inden-5-on

(c) główna grupa charakterystyczna i wolne wiązalności (przyrostki):

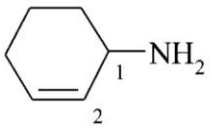
Przykłady:

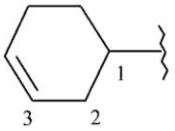


kwas 3,4-dichloronaftaleno-1,6-dikarboksylowy (PIN)



6-karboksynaftalen-2-yl (preferowany przedrostek)

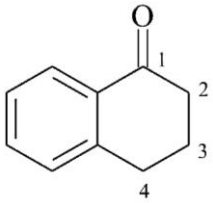




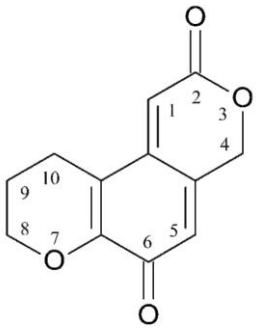
cykloheks-2-en-1-amina (PIN) cykloheks-3-en-1-yl (preferowany przedrostek)

(d) ‘dodany wskazany atom wodoru’ (zgodnie ze strukturą związku i z dalszym podstawieniem):

Przykłady:



3,4-dihydronaftalen-1(2*H*)-on (PIN)

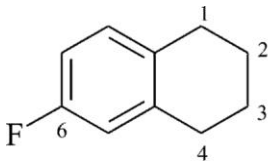


9,10-dihydro-2*H*,4*H*-benzo[1,2-*b*:4,3-c′]dipirano-2,6(8*H*)-dion (PIN)

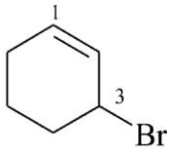
(e) nasycenie/nienasycenie

(1) niskie lokanty otrzymują przedrostki hydro/dehydro (patrz pierwszy przykład i P-31.2.2) i końcówki'en'i 'yn';
(2) niskie lokanty otrzymują wiązania wielokrotne najpierw jako zestaw a później wiązania podwójne (patrz przykłady drugi i trzeci oraz P-31.1.1.1);

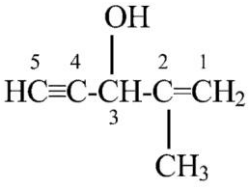
Przykłady:



6-fluoro-1,2,3,4-tetrahydronaftalen (PIN)



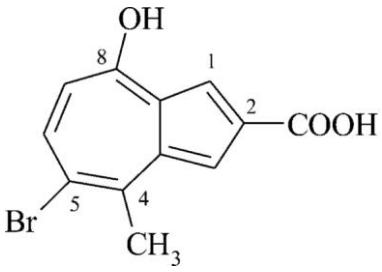
3-bromocykloheks-1-en (PIN)



2-metylopent-1-en-4-yn-3-ol (PIN)
(nie 4-metylopent-4-en-1-yn-3-ol)

(f) rozłączne, ustawione alfabetycznie przedrostki rozpatrywane łącznie w serii rosnących lokantów

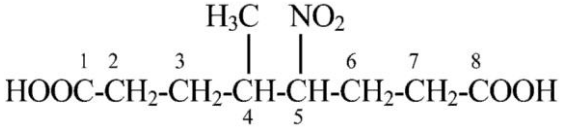
Przykłady:



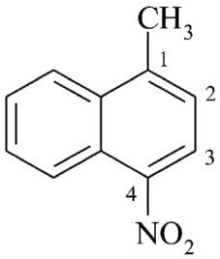
kwas 5-bromo-8-hydroxy-4-metyloazuleno-2-karboksylowy (PIN)
(zestaw lokantów przedrostków '4,5,8' jest niższy od '4,7,8')

(g) niższy lokant dla podstawnika wymienianego jako pierwszy przedrostek w nazwie;

Przykłady:



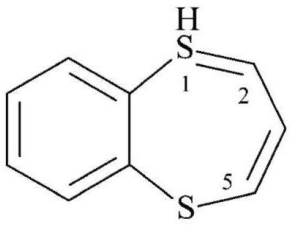
kwas 4-metylo-5-nitrooktanodiowy (PIN)

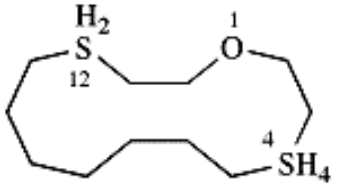


1-metylo-4-nitronaftalen (PIN)
(nie 4-metylo-1-nitronaftalen)

(h) Jeśli trzeba wybrać między takimi samymi atomami szkieletu w różnych stanach walencyjnych to niższy lokant otrzymuje atom w niestandardowym stanie walencyjnym. Jeżeli nadal trzeba wybierać między takimi samymi atomami szkieletu w dwóch lub wiecej stanach walencyjnych, to niższy lokant otrzymuje atom w wyższym stanie walencyjnym.

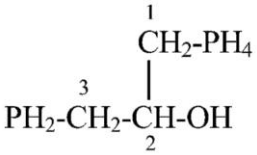
Przykłady:





λ^4,5-benzoditiepin (PIN)

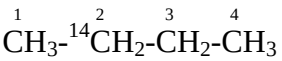
1-oksa-4λ^6,12λ^4-ditiacyklotetradekan (PIN)



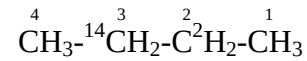
1-(λ^5-fosfanylo)-3-fosfanylopropan-2-ol (PIN)
(λ^5-fosfanyl jest wymieniony jako pierwszy i ma niższy lokant niż fosfanyl)

(i) Jeżeli istnieje wybór między równorzędnymi sposobami numerowania w związku izotopowo nie modyfikowanym, to punkt rozpoczęcia i kierunek numerowania analogicznie izotopowo podstawionych pozycji wybiera się tak, aby dać niższe lokanty modyfikowanym atomom lub grupom rozpatrywanym łącznie jako zestaw według wzrastającego numerowania. Jeżeli ciągle istnieje wybór, niższy lokant otrzymuje nuklid o wyższej liczbie atomowej. W przypadku różnych nuklidów tego samego pierwiastka, niższy lokant otrzymuje nuklid o wyższej liczbie masowej.

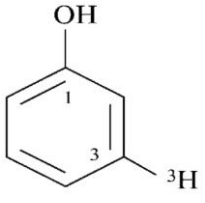
Przykłady:



(2-^{14}C)butan (PIN)
[nie (3-^{14}C)butan]



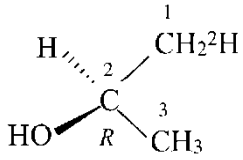
(3-^{14}C,2,2-^{2}H$_2$)butan (PIN)
[nie (2-^{14}C,3,3-^{2}H$_2$)butan]



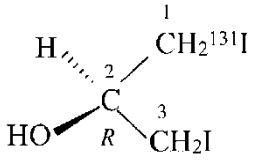
CH_3-$^{14}CH_2$-CH^2H-CH_3

(2-^{14}C,3-$^{2}H_1$)butan (PIN)
[nie 3-^{14}C,2-$^{2}H_1$)butan]

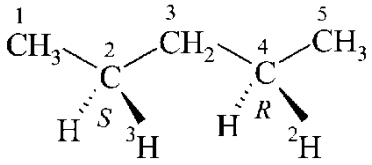
(3-^{3}H)fenol (PIN)



(2*R*)-(1-$^{2}H_1$)propan-2-ol (PIN)



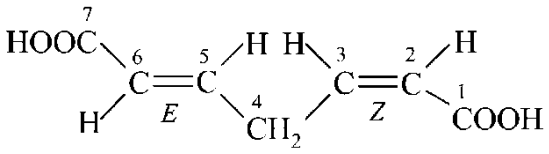
(2R)-1-(^{131}I)jodo-3-jodopropan-2-ol (PIN)
(patrz P-82.2.2.1)



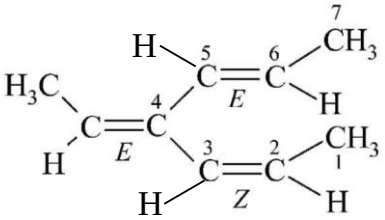
(2*S*,4*R*)-(4-$^{2}H_1$,2-$^{3}H_1$)pentan (PIN)
[nie (2*R*,4*S*)-(2-$^{2}H_1$,4-$^{3}H_1$)]pentan ; izotopowe modyfikacje mają pierwszeństwo przed stereodeskryptorami (opisanymi w punkcie j) w wyborze niskich lokantów

(j) Jeżeli istnieje konieczność wyboru niższych lokantów związana z obecnością centrów stereogenicznych lub stereoizomerów, niższe lokanty przypisuje się sterodeskryptorom CIP: *Z, R, M* i *r* (pseudoasymetria) są preferowane wobec *E, S, P* i *s*, a te są preferowane względem nie-CIP stereodeskryptorów *cis, trans* i *r* (atom referencyjny), *c* i *t* (patrz P-91.2 na stereodeskryptory CIP i nie-CIP).

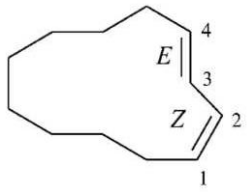
Przykłady:



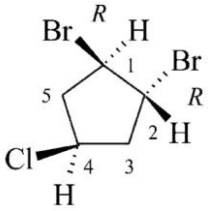
kwas (2*Z*,5*E*)-hepta-2,5-dienodiowy (PIN)
(łańcuch numeruje się tak, aby wiązanie podwójne '*Z*' miało niższy lokant)



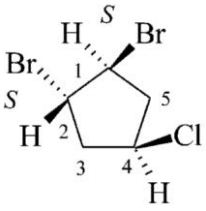
(2 *Z*,4*E*,5*E*)-4-etylidenohepta-2,5-dien (PIN)
(niższe lokanty przypisane zostały dłuższemu łańcuchowi, a kolejne wiązaniu podwójnemu '*Z*')



(1*Z*,3*E*)-cyklododeka-1,3-dien (PIN)

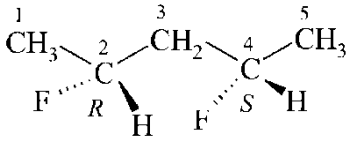


lub

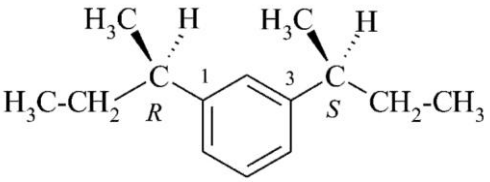


rel-(1*R*,2*R*)-1,2-dibromo-4-chlorocyklopentan (PIN)
1*r*,2*t*-dibromo-4*c*-chlorocyklopentan

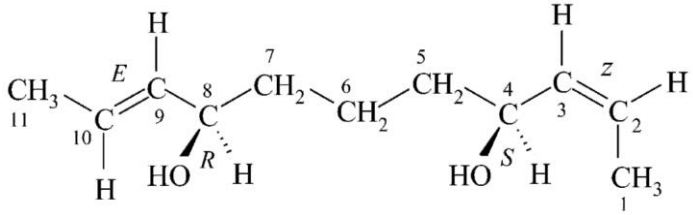
(w preferowanej nazwie IUPAC używa się stereodeskryptory CIP; w drugiej nazwie względną konfigurację opisują stereodeskryptory nie-CIP, ‘1*r*,2*t*,4*c*’ a nie ‘1*r*,2*t*,4*t*’ ponieważ konfiguracja ‘*cis’* zapisywana jako *‘c’* ma pierwszeństwo przed ‘*trans*’ oznaczonym ‘*t*’, w pozycji ‘4’.



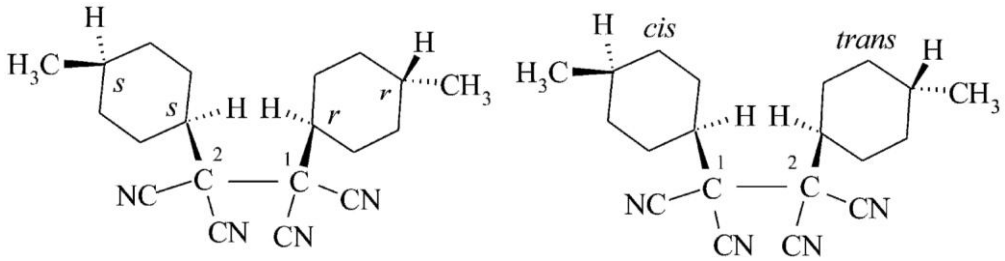
(2*R*,4*S*)-2,4-difluoropentan (PIN)



1-[(2*R*)]-butan-2-ylo]-3-[(2*S*)-butan-2-ylo]benzen (PIN)



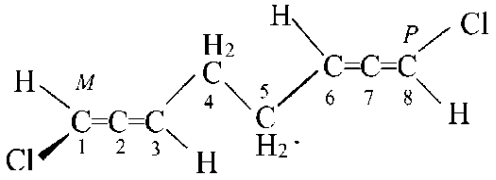
(2*Z*,4*S*,8*R*,9*E*)-undeka-2,9-dieno-4,8-diol (PIN)
(ważny jest wybór między '*E*' i '*Z*' dla pozycji '2'
a nie miedzy *R* i *S* dla pozycji '4')



I **II**

(I) 1-[(1*r*,4*r*)-4-metylocykloheksylo]-2-[(1*s*,4*s*)-4-metylocykloheksylo]etano-1,1,2,2-tetrakarbonitryl (**I**) (PIN); podstawnik oznaczony sterodeskryptorami *r* otrzymuje niższy lokant, '1'; użycie stereodeskryptorów CIP prowadzi do preferowanej nazwy IUPAC.

(II) 1-(*cis*-4-metylocykloheksylo)-2-(*trans*-4-metylocykloheksylo) –etano-1,1,2,2- tetrakarbonitryl (podstawnik ;*cis*' otrzymuje najnizszy lokant '1')



(1*M*,6*P*)-1,8-dichlorookta-1,2,6,7-tetraen (PIN)

P-14.5 PORZĄDEK ALFANUMERYCZNY

Porządek alfanumeryczny zwyczajowo nazywa się 'porządkiem alfabetycznym'. Ponieważ te zasady porządkowania obejmują zarówno litery jak i liczby, w ścisłym znaczeniu lepiej używać 'porządek alfanumeryczny' dla podkreślenia, że bierze się zarówno jedne jak i drugie pod uwagę .

Porządek alfanumeryczny stosuje się do ustalenia kolejności wymieniania rozłącznych przedrostków podstawnikowych (ale nie rozłącznych przedrostków określajacych nasycenie, hydro i dehydro) i – o ile istnieje mozliwość wyboru -numerowania łańcucha, pierścienia lub układu pierścieniowego .

Stosowanie porządku alfanumerycznego w nomenklaturze organicznej jest następujące. Nie pisane kursywą litery rozpatruje się jako pierwsze chyba że stosuje się je jako lokanty lub część zespolonych bądź złożonych lokantów, na przykład '*N*' lub '4a' (patrz P-14.3) a także jako deskryptory izotopowe. Jeśli wszystkie litery są identyczne, porównuje się zestawy lokantów obejmujące wszystkie początkowe lokanty głównych podstawników, to jest lokantów pojawiających się przed pierwszymi literami nazwy podstawnika. Najkorzystniejszą sytuacją jest brak lokantów liczbowych, pierwszeństwo mają litery łacińskie, po nich pojawiają się pisane kursywą lokanty literowe, najpierw litery alfabetu łacinskiego, a następnie – o ile są - greckiego (jak w nazwach łączonych) oraz liczby arabskie w kolejności od najmniejszej do największej.Tak więc preferowany porządek jest nastepujący: litery nie pisane kursywą > litery pisane kursywą > greckie litery.

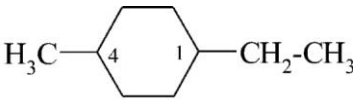
Porządek nie-alfanumerycznych znaków opisany jest w P-14.6.

W tym podrozdziale zasady porządku alfanumerycznego nie obejmują greckich liter za wyjątkiem nazw łączonych) ani deskryptorów izotopowych czy stereochemicznych.

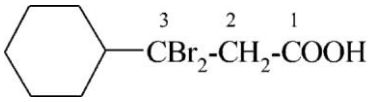
P-14.5.1 Proste przedrostki (to znaczy te wskazujące atomy i niepodstawione podstawniki) szereguje się alfabetycznie, a następnie dodaje się przedrostki zwielokrotniające, nie zmieniając już ustalonego porządku alfabetycznego.

Przykłady:

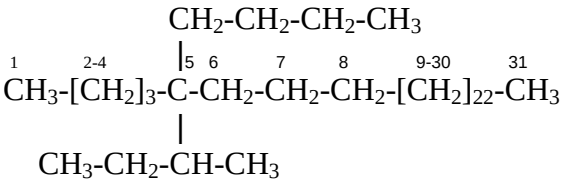
1-etylo-1-metylocykloheksan (PIN)



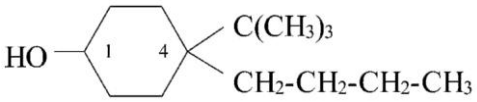
1-etylo-4-metylocykloheksan (PIN)
(numerowanie patrz P-14.4(g)



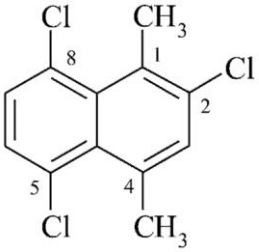
kwas 3,3-dibromo-3-cykloheksylopropanowy (PIN)
(nie kwas 3-cykloheksylo-3,3-dibromopropanowy)



(5-butan-2-ylo)-5-butylohentriakontan (PIN)
[(butyl nie jest nazywany butan-1-ylem;
użycie nawiasów patrz P-16.5.1.2)]



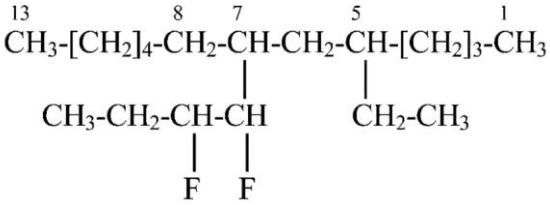
4-butylo-4-*tert*-butylocykloheksan-1-ol (PIN)



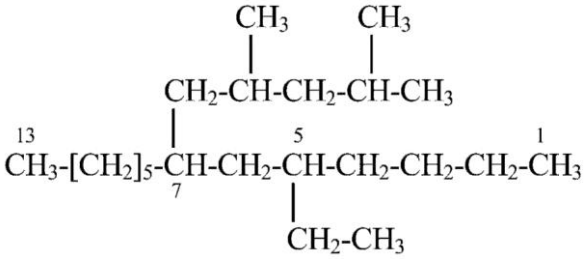
2,5,8-trichloro-1,4-dimetylonaftalen (PIN)
[nie 1,4-dimetylo-2,5,8-trichloronaftalen; ‘trichloro’ wymienia się przed ‘dimetylo’ ponieważ ‘chloro’ jest przed ‘metylo’]
[nie 1,4,6-trichloro-5,8-dimetylonaftalen; zestaw lokantów ‘1,2,4,5,8’jest niższy od ‘1,4,5,6,8’ (patrz P-14.3.5)]

P-14.5.2 Za nazwę przedrostka dla podstawnika uważa się nazwę rozpoczynającą się od pierwszej litery jego pełnej nazwy.

Przykłady:



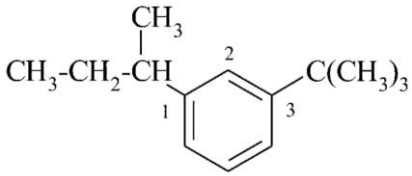
7-(1,2-difluorobutylo)-5-etylotridekan (PIN)
[(nie 5-etylo-7-(difluorobutylo)tridekan; nazwa
podstawnika w PIN zaczyna się od ‘d’, wcześniejszego od ‘e’]



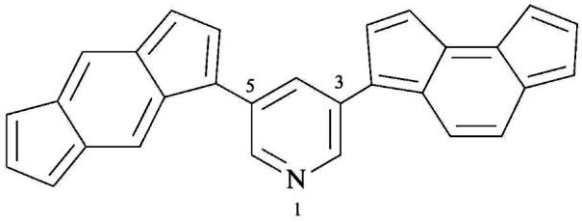
7-(2,4-dimetylopentylo)-5-etylotridekan (PIN)
(‘dimetylopentyl’ zaczyna się od ‘d’, które jest przed przed ‘e’w alfabecie)

P-14.5.3 Jeżeli litery nie pozwalaja na ustalenie porządku alfanumerycznego i kolejności wymienia w nazwie, należy rozpatrzyć litery pisane kursywą.

Przykłady:



3-*tert*-butylo-1-(1-metylopropylo)benzen
1-(butan-2-ylo)-3-*tert*-butylobenzen (PIN)
(użycie nawiasów patrz P-16.5.1.2)
(nie sec-butylo-3-*tert*-butylobenzen)

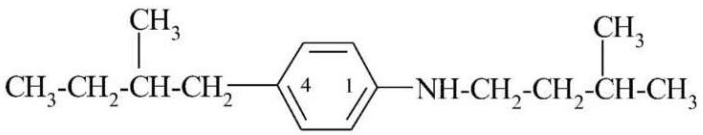


3-(*as*-indacen-3-ylo)-5-(*s*-indacen-1-ylo)pirydyna (PIN)
[nie 5-(*s*-indacen-1-ylo)-3-(*as*-indacen-3-ylo)pirydyna]

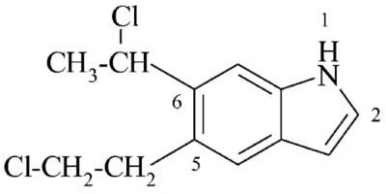
I, analogicznie, nafto[1,2-*f*]chinolin-2-yl jest alfanumerycznie preferowany względem nafto[1,2-*g*]chinolin-1-ylu (‘f ’ jest przed ‘g’).

P-14.5.4 Jeżeli nazwy dwu lub więcej przedrostków składają się z takich samych liter, pierwszeństwo w wymienianiu ma nazwa zawierająca najniższy lokant w pierwszym miejscu różnicy.

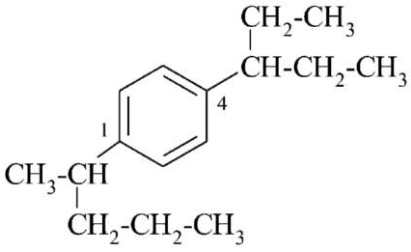
Przykłady:



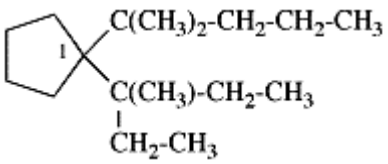
4-(2-metylobutylo)-*N*-(3-metylobutylo)anilina (PIN)
4-(2-metylobutylo)-*N*-(3-metylobutylo)benzenoamina
(przy porządkowaniu podstawników ponieważ ‘2’ jest mniejsze od ‘3’ fakt, ze ‘*N’* jest niższe od ‘4’ nie ma znaczenia)



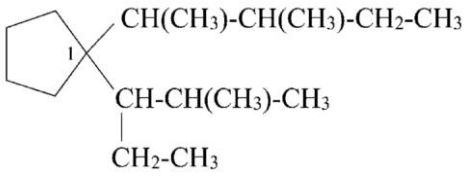
6-(1-chloroetylo)-5-(2-chloroetylo)-1*H*-indol (PIN)
(lokant ‘1’ jest niższy od ‘2’)



1-(pentan-2-ylo)-4-(pentan-3-ylo)benzen (PIN)
(lokant ‘2’ jest niższy od ‘3’; użycie nawiasów patrz P- 16.5.1.2)



1-(2-metylopentan-2-ylo)-1-(3-metylopentan-3-ylo)cyklopentan (PIN)
[nie 1-(3-metylopentan-3-ylo)-1-(2-metylopentan-2-ylo)cyklopentan;
zestaw lokantów ‘2,2’ jest niższy od ‘3,3’]



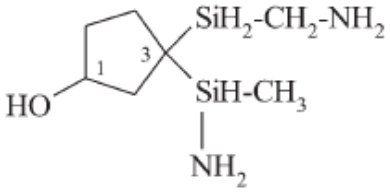
1-(2-metylopentan-3-ylo)-1-(3-metylopentan-2-ylo)cyklopentan (PIN)
[nie 1-(3-metylopentan-3-ylo)-1-(2-metylopentan-2-ylo) cyklopentan; zestaw lokantów ‘2,3’ jest niższy od ‘3,2’)

P-14.6 PORZĄDEK NIE-ALFANUMERYCZNY

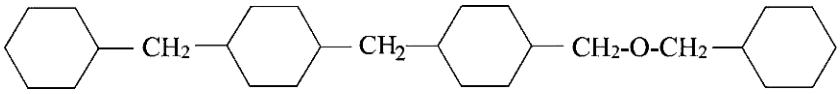
Porządek alfanumeryczny rozwiązuje praktycznie wszystkie problemy związane z kolejnością poszczególych składników w nazwach zwiazków organicznych. Jednakże zdarzają się czasem nazwy mające identyczne wszystkie znaki alfanumeryczne. W takich przypadkach inne znaki, takie jak nawiasy lub znaki interpunkcyjne, muszą być porównywane z literami i/lub liczbami, lub ze sobą aż do wyboru preferowanej nazwy IUPAC. Litery i liczby zawsze mają pierwszeństwo przed innymi znakami. Jeżeli zachodzi taka konieczność, uwzględnienie malejącej kolejność pierwszeństwa innych znaków jest następujace: nawiasy klamrowe > nawiasy kwadratowe > nawiasy okrągłe > kropki > przecinki > średniki > dwukropki > łączniki.

Uwaga: Poprzednie zalecenia nie przewidywały reguł wyboru preferowanej nazwy spoza kolejności znaków alfanumerycznych. Dla związków , dla których znaki alfanumeryczne nie prowadzą do jedynej nazwy, potrzebny jest porządek nie-alfanumerycznych znaków takich jak przecinki, nawiasy itd. Informacje na ten temat podaje poniższy paragraf.

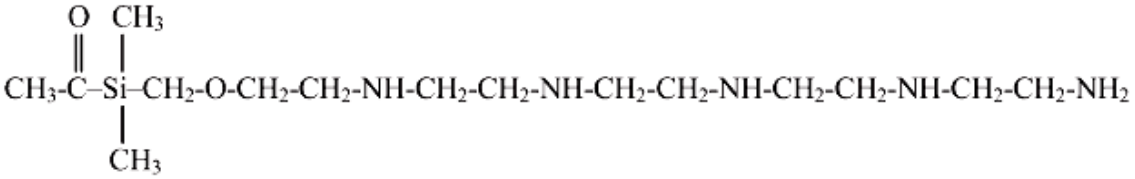
Przykłady:



3-[amino(metylo)sililo]-3[(aminometylo)sililo]cyklopentan-1-ol (PIN)
{nie 3-[(aminometylo)sililo]-3-[amino(metylo)sililo]cyklopentan-1-ol; alfanumeryczne znaki są identyczne; czwarty znak w nazwie, litera ‘a’ jest preferowana względem nawiasu okrągłego}



1-[(cykloheksylometoksy)metylo]-4-{[4-cykloheksylometylo]cykloheksylo]metylo}cykloheksan (PIN)
{nie 1-({4-cykloheksylometoksy)metylo]cykloheksylo}metylo)-4-(cykloheksylometylo)-cykloheksan [wszystkie litery i lokanty podstawników pierwszego rzędu w obu nazwach są identyczne; jednakże w PIN pierwszy podstawnik, którego nazwa jest w nawiasie, nie ma lokantu, a w nazwie alternatywnej ma lokant ‘4’ a brak lokantu jest preferowany względem lokantu ‘4’}

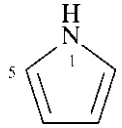


19-amino-3,3-dimetylo-5-oksa-8,11,14,17-tetraaza-3-silanonadekan-2-on (PIN)
N-{2-[(acetylodimetylosililo)metoksy]etylo}-*N'*-[2-({2-[2-aminoetylo)amino]etylo}amino)etylo]etano-1,2-diamina
N-[2-({2-[(acetylodimetylosililo)metoksy]etylo}amino)etylo]-*N'*-{2-[2-aminoetylo)amino]etylo}etano-1,2-diamina [strukturą macierzystą musi być diamina; porządek alfanumeryczny pierwszych dwóch nazw jest taki sam, a trzeci znak nie-alfanumeryczny '{'jest preferowany względem '(']

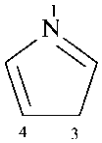
P-14.7 WSKAZANY I 'DODANY WSKAZANY' ATOM WODORU

P-14.7.1 Wskazany atom wodoru. W pewnych okolicznościach konieczne jest zasygnalizowanie w nazwie pierścienia lub układu pierścieniowego mancude, to znaczy takiego, który zawiera maksymalną liczbę nieskumulowanych wiązań podwójnych, i jedną lub więcej pozycji w których nie ma wiązania podwójnego. Jeżeli w tych pozycjach znajdują się atomy wodoru to można uszczegółowić nazwę wskazując pozycję jednego lub większej liczby atomów wodoru; osiąga się to dodając na początku nazwy pisaną kursywą literę '*H*' poprzedzoną odpowiednim lokantem liczbowym każdego z tych atomów.

Przykłady:



1*H*-pirol (PIN)
pirol



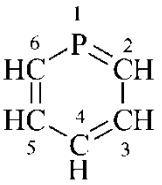
3*H*-pirol (PIN)

W pierwszym przykładzie 'wskazany atom wodoru' pozwala zlokalizować jeden atom wodoru w pozycji '1' pierścienia pirolu; w drugim przykładzie 'wskazany atom wodoru' oznacza 'ekstra' atom wodoru w pozycji 3, to znaczy jeden atom wodoru więcej, niż gdyby w tej pozycji było podwójne wiązanie. Tego rodzaju wskazany atom wodoru poprzedza nazwę macierzystego wodorku. W ogólnej nomenklaturze można pominąć wskazany atom wodoru (patrz P-25.7.1.3) i 1*H*-pirol można nazwać po prostu pirolem. Jednakże w nazwie preferowanej przez IUPAC należy wymieniać lokant i symbol '*H*'.

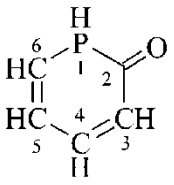
Szczegółowe procedury stosowania 'wskazanego atomu wodoru' są dyskutowane w P-58.2.1.

P-14.7.2 'Wskazany dodany atom wodoru'. Drugi rodzaj wskazanego atomu wodoru nazywa się 'dodanym wskazanym atomem wodoru'. Opisuje on atomy wodoru dodane do określonej struktury jako skutek modyfikacji strukturalnych wskazywanych przyrostkiem lub przedrostkiem. 'Wskazany dodany atom wodoru' wymienia się w nawiasie po lokancie cechy struktury której dotyczy.

Przykłady:



fosfinin (PIN)

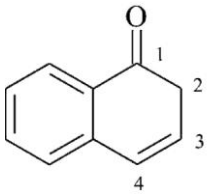


fosfinin-2(1*H*)-on (PIN)

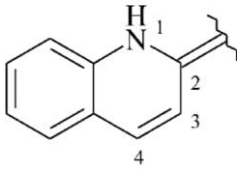
‘Wskazany dodany atom wodoru’ służy do wprowadzania wolnej wiązalności, centrum rodnikowego lub jonowego a także głównej grupy charakterystycznej do całkowicie nienasyconego związku heteromonocyklicznego lub skondensowanego układu pierścieniowego wobec braku lub nieobecności wystarczającej liczby atomów wodoru niezbędnych do zrealizowania tej operacji w zamierzonym miejscu. Takie podstawione związki nazywa się stosując przyrostki wskazujące operację na grupie –CH= lub atomie =C<, lub na ekwiwalentnych heteroatomach takich jak –N=, lub grupach takich jak =NH.

Szczegółowe procedury stosowania ‘wskazanego dodanego atomu wodoru’ są opisane w P-58.2.2.

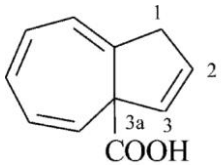
Przykłady:



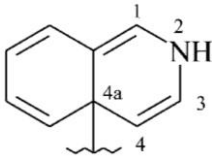
naftalen-1(2*H*)-on (PIN)



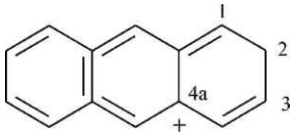
chinolin-2(1*H*)-yliden (preferowany przedrostek)



kwas azuleno-3a(1*H*)-karboksylowy



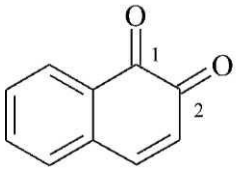
izochinolin-4a(2*H*)-yl (preferowany przedrostek)



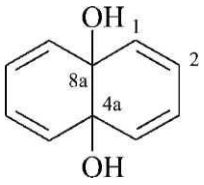
antracen-4a(2*H*)-ylium (PIN)

W nazwach preferowanych przez IUPAC nie wymienia się ‘wskazanego dodanego atomu wodoru’ wtedy, gdy dwie identyczne grupy charakterystyczne praktycznie usuwające jedno z wiązań podwójnych są wskazywane przyrostkami w związku mancude.

Przykłady:



naftaleno-1,2-dion (PIN)



naftaleno-4a,8a-diol (PIN)

P-14.8 ADDUKTY

P-14.8.1 Organiczne addukty

Addukt jest rodzajem chemicznym, którego każde indywiduum molekularne utworzone jest przez bezpośrednią kombinację oddzielnych indywiduów molekularnych w dowolny sposób, bez utraty atomów biorących w niej udział komponentów (patrz odn. 19).

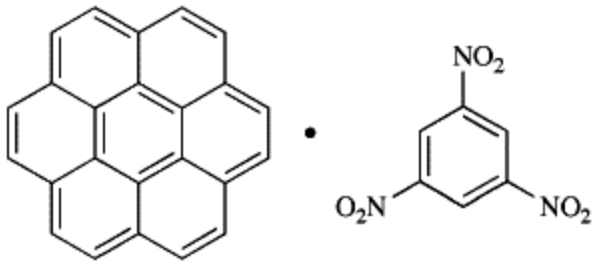
W tym podrozdziale rozważane są tylko addukty utworzone ze związków organicznych. Addukty nieorganiczne omówiono w odn. 12, IR-5.5. Rozpatrywane są dwa różne typy adduktów organicznych, addukty Lewisa i π-addukty. Sole organicznych zasad i kwasów o nieznanej strukturze nazywa się w podobny sposób, opisany w rozdziale P-7. W ogólnej nomenklaturze podana definicja adduktu może obejmować inne rodzaje przedstawiane jako addukty, na przykład butadien—chlorowodór.

Wzory tych adduktów zapisuje się w kolejności zgodnej z ogólnymi zasadami starszeństwa związków organicznych podanymi w P-41. Nazwy tworzy się wymieniając, w kolejności wzorów, nazwy poszczególnych związków połączone długim łącznikiem (—) lub dwoma myślnikami (--) bez odstępu. Proporcje składników wskazuje się po nazwie, w nawiasie, cyframi arabskimi przedzielonymi ukośnikiem .

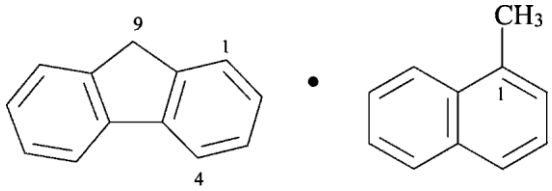
Sole i addukty Lewisa pomiędzy związkami boru i pierwiastków grupy 15, w których sposób przyłączenia wskazuje się pisanymi kursywą symbolami, omówione są w P-68.1.6.

W adduktach złożonych wyłącznie ze związków organicznych poszczególne składniki wymienia się we wzorach w kolejności starszeństwa klas (patrz P-41), a nie odpowiednio do liczby rodzajów w addukcie ani według porządku alfanumerycznego jak rekomendowano w Zaleceniach z 1979 roku (Reguła D-1.55, odn. 1) i w rewizji *Nomenclature of Inorganic Chemistry, Recommendations* 2005 (odn. 12). We wzorach adduktów złożonych ze związków organicznych i nieorganicznych, związki organiczne rysuje się najpierw. Nazwy tworzy się wymieniając nazwy poszczególnych składników w kolejności takiej jak we wzorze. Zastosowanie jako kryterium klasyfikacji porządku starszeństwa, uniwersalnego systemu, preferuje się względem zależnego od języka porządku alfanumerycznego i to zarówno w nazwach preferowanych przez IUPAC jak i ogólnej nomenklaturze.

Przykłady:



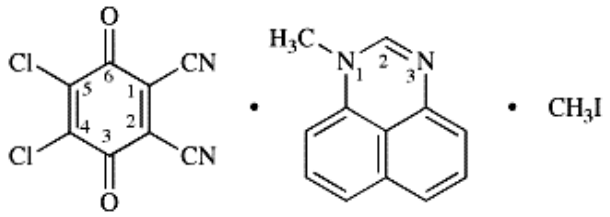
koronen—1,3,5-trinitrobenzen (1/1) (PIN)



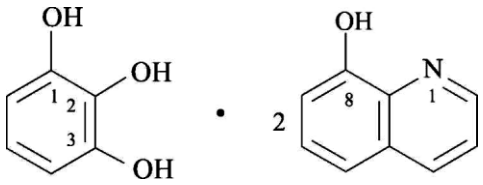
9*H*-fluoren—1-metylonaftalen (1/1) (PIN)

$[(HOOC\text{-}CH_2\text{-}NH)\text{-}(CH_2)_2]_2\text{-}N\text{-}CH_2\text{-}COOH \bullet HN[CH_2\text{-}P(O)(OH)_2]_2 \bullet H_2N\text{-}(CH_2)_2\text{-}NH_2$

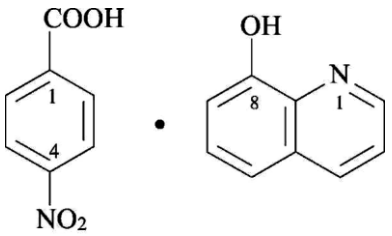
kwas {[karboksymetylo]azanodiylo]bis(etano-2,1-diyloazanodiylo)}dioctowy—[azanodiylobis(metyleno)]bis(kwas fosfonowy)—etano-1,2-diamina (1/1/1)
N,*N*'- {[karboksymetylo)azanodiylo] dietano-2,1-diylo}diglicyna—azanodiylobis – (metyleno)bis(kwas fosfonowy)—etano-1,2-diamina (1/1/1)



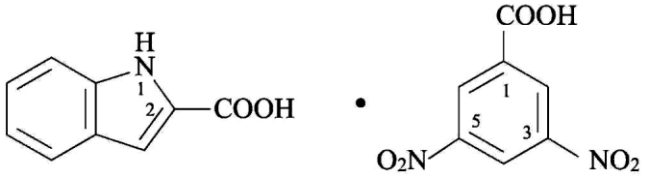
4,5-dichloro-3,6-dioksocykloheksa-1,4-dieno-1,2-karbonitryl—1-metylo-1*H*-perimidyna—jodometan (1/1/1) (PIN)



benzeno-1,2,3-triol—chinolin-8-ol (1/2) (PIN)



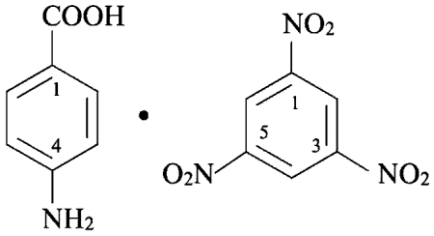
kwas 4-nitrobenzoesowy—chinolin-8-ol (1/1) (PIN)



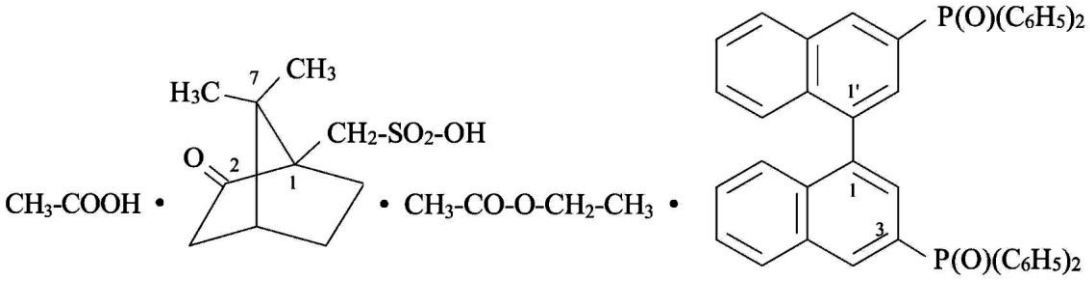
kwas 1*H*-indolo-2-karboksylowy—kwas 3,5-dinitrobenzoesowy (1/1) (PIN)

$(C_6H_5)Fe(C_6H_4\text{-}CHO) \cdot C_6H_6 \cdot CBr_4$

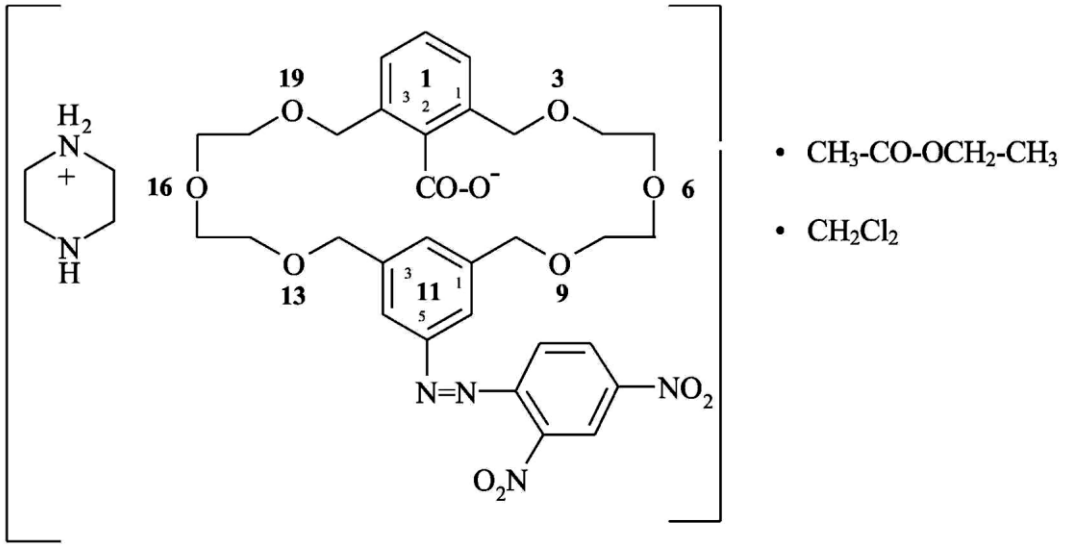
ferrocenokarboaldehyd—benzen—tetrabromometan)1/1/1)



kwas 4-aminobenzoesowy—1,3,5-trinitrobenzen (1/1) (PIN)



kwas octowy—kwas (7,7-dimetylo-2-oksobicyklo[2.2.1]heptan-1-ylo)metanosulfonowy—octan etylu—[1,1-binaftaleno]-2,2′-diylo(difenylo)-λ^5-fosfanon) (1/1/1) (PIN)

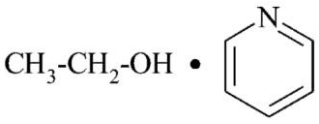


{ 11^5-[2-(2,4-dinitrifenylo)diazenyl-1-ylo piperazyn-1-ium]-3,6,9,13,16,19-heksaoksa-1,11(1,3) -dibenzenocykloikozafano-1^2-karboksylan}—octan etylu—dichlorometan (1/1/1) (PIN)

{13-[(2,4-dinitrofenylo)azo]3,6,9,17,20,23-heksaoksatricyklo[23.3.1.$1^{11,15}$]triakonta-1(29),11(30),12,14,25,27-heksaenokarboksylan piperazyn-1-ium}—octan etylu—dichlorometan (1/1/1)

Solwaty, w tym hydraty (patrz P-14.8.2) traktuje się jak addukty i preferowane dla nich nazwy IUPAC muszą uwzgledniać opisaną notację wskazującą proporcje ich składników. W ogólnej nomenklaturze hydraty można nazywać dodając do nazwy wyraz ‘hydrat’ poprzedzony odpowiednim przedrostkiem liczbowym, takim jak ‘mono’, ‘di’, ‘tri’ itd. Można również używać terminy takie jak ‘hemi’ i ‘seskwi’.

Przykłady:



etanol—pirydyna (1/1) (PIN)

P-14.8.2 Mieszane addukty organiczno-nieorganiczne

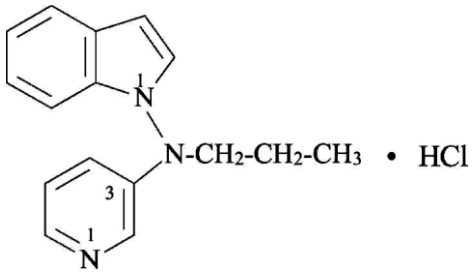
Wzory mieszanych adduktów złożone z organicznych i nieorganicznych rodzajów chemicznych zapisuje się w kolejności: składniki organiczne w kolejności opisanej w P-14.8.1, składniki nieorganiczne w porządku opisanym w odn. 14; wodę (o ile występuje) wymienia się na końcu.

Chociaż składniki organiczne mają preferowane nazwy IUPAC, mieszane addukty nie mogą mieć preferowanych nazw IUPAC ponieważ dla składników nieorganicznych takie nazwy jeszcze nie istnieją.

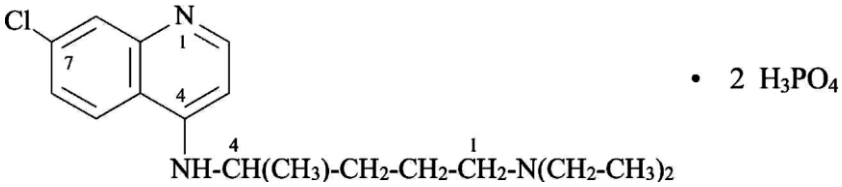
Tym niemniej nazwy mieszanych adduktów tworzy się wymieniając nazwy kolejnych składników, połączone długim łącznikiem (—) lub podwójnym myślnikiem (--). Proporcje składników wskazuje się po nazwie umieszczonymi w nawiasie cyframi arabskimi przedzielonymi ukośnikami. Hydraty można nazywać dodając do nazwy słowo 'hydrat' poprzedzone odpowiednim

przedrostkiem liczbowym, ‘mono’, ‘di’, ‘tri’ itd. . Można też stosować terminy takie jak 'hemi' i 'seskwi'.

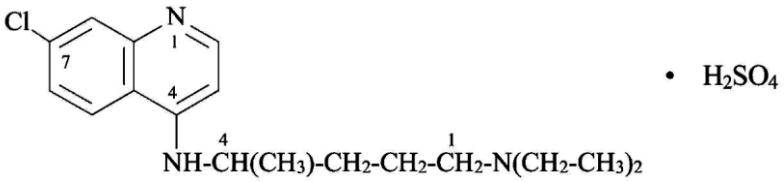
Przykłady:



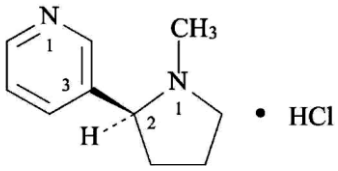
N-propylo-*N*-(pirydyn-3-ylo)-1*H*-indolo-1-amina—chlorowodór (1/1)



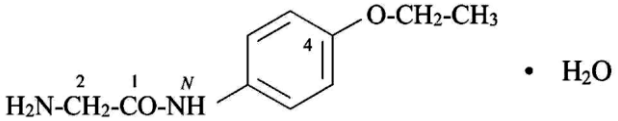
N^4-(7-chlorochinolin-4-ylo)-N^1,N^1-dietylopentano-1,4-diamina—kwas fosforowy (1/2)



N^4-(7-chlorochinolin-4-ylo)-N^1,N^1-dietylopentano-1,4-diamina—kwas siarkowy (1/1)



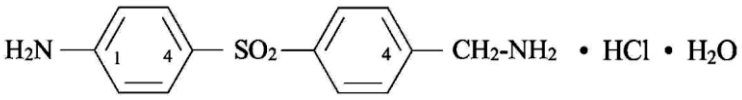
3-[(2*S*)-1-metylopirolidyn-2-yl]pirydyna—chlorowodór (1/1)



2-amino-*N*-(4-etoksyfenylo)acetamid—woda (1/1)
2-amino-*N*-(4-etoksyfenylo)acetamid monohydrat

$$HOOC\text{-}COOH \bullet H_2N\text{-}CH_2CH_2\text{-}NH_2 \bullet 3/2\ H_2O$$

kwas szczawiowy—etano-1,2-diamina—woda (2/2/3)
kwas szczawiowy—etano-1,2-diamina seskwihydrat



4-[4-(aminometylo)benzeno-1-sulfonylo]anilina—chlorowodór—woda (1/1/1)

P-15 RODZAJE NOMENKLATURY

P-15.0 Wprowadzenie
P-15.1 Nomenklatura podstawnikowa
P-15.2 Nomenklatura klasowo-funkcyjna
P-15.3 Nomenklatura multiplikacyjna
P-15.4 Nomenklatura zamienna (‘a’) szkieletu
P-15.5 Nomenklatura zamienna funkcji
P-15.6 Nomenklatura łączona

P-15.0 WPROWADZENIE

‘Nomenklatura’, w chemii, jest systemem tworzenia nazw przy użyciu różnych operacji nomenklaturowych zgodnie z zestawem zasad, reguł i konwencji. Zasadniczo istnieją dwa rodzaje nomenklatury: (1) nomenklatura podstawnikowa, główna nomenklatura stosowana w chemii organicznej i podstawa preferowanych organicznych nazw IUPAC; i (2) nomenklatura addytywna używana w chemii nieorganicznej do tworzenia nazw koordynacyjnych. Te dwa rodzaje nazw stosuje się do nazywania związków organicznych i związków nieorganicznych , czyniąc nomenklaturę kwestią wyboru między nimi. Na przykład $SiCl_4$ można nazwać tetrachlorkiem krzemu (nazwa dwuskładnikowa, binarna), tetrachlorydosilanem (nazwa koordynacyjna) i tetrachlorosilanem (nazwa podstawnikowa). Chociaż w tych zaleceniach nomenklatura koordynacyjna nie jest dyskutowana to jest ona stosowana dla związków metaloorganicznych atomów metali należących do grupy 1 i 2, np. dimetylomagnez. Nazwy binarne stosuje się dla soli złożonych z anionowych i kationowych części organicznych, na przykład octan sodu i chlorek metanoaminium. Zaleca się preferowane nazwy IUPAC zawsze gdy istnieje wybór w granicach nomenklatury związków organicznych, na przykład wybór między dwiema nazwami podstawnikowymi (kwas etanowy i kwas octowy), miedzy nazwą multiplikacyjną i podstawnikową (kwas 2,2'-oksydioctowy i (kwas [(karboksymetylo)oksy]octowy) lub pomiędzy nazwą podstawnikową i nazwą klasowo-funkcyjną (bromometan – bromek metylu) ale nie gdy istnieje wybór między między nazwą koordynacyjną lub binarną a nazwą organiczną, na przykład gdy można by było wybierać między nazwą podstawnikową a koordynacyjną (tetrachlorosilan i tetrachlorysilan).

Nomenklatura związków organicznych jest zestawem różnych rodzajów nomenklatury wykorzystujących różne operacje opisane w P-13. Pojęcie nomenklatura jest zazwyczaj związane z więcej niż jednym rodzajem operacji. **Nomenklaturę podstawnikową** można rozpatrywać jako bazującą na operacjach podstawienia, addycji i subtrakcji. Podstawą **nomenklatury klasowo-funkcyjnej** jest w zasadzie operacja addycji, ale obejmuje ona też nazwy podstawników

utworzonych zgodnie z nomenklaturą podstawnikową. **Nomenklatura multiplikacyjna** jest podzbiorem nomenklatury podstawnikowej opartym na sfunkcjonalizowanych lub nie sfunkcjonalizowanych cyklicznych wodorkach macierzystych, na sfunkcjonalizowanych acyklicznych wodorkach macierzystych i na heteroacyklicznych wodorkach macierzystych. **Nomenklatura zamienna szkieletu** odnosi się do członów zamiennych 'a' i dlatego jest często nazywana po prostu **nomenklaturą 'a'**. Podobnie **nomenklatura łączona** jest ograniczona do operacji łączenia pierścieni lub układów pierścieni podstawionych łańcuchem z grupą główną nazywanych podstawnikowo lub mających nazwę zwyczajową. I w końcu **nomenklatura zamienna funkcji** definiuje reguły użycia przedrostków i wrostków do wskazania zamiany atomów tlenu lub grup z atomami tlenu na atomy azotu, grupy azotowe, atomy chalkogenów, atomy halogenów, grupy peroksy itd. (patrz 15.5).

Tak więc zazwyczaj nomenklatura nie jest związana z jednym tylko rodzajem operacji, tworzenie nazwy w jakimś systemie nomenklatury wymaga serii operacji różnego rodzaju, na przykład operacji subtrakcji przy tworzeniu podwójnego wiązania i operacji zamiany funkcji przy zastąpieniu atomu tlenu atomami chalkogenu lub azotu.

Termin nomenklatura odnosi się też do rodzin i klas związków, na przykład **nomenklatura rodników i jonów, nomenklatura fanów** przeznaczona do nazywania związków złozonych z łańcuchów i/lub układów pierścieniowych, i **nomenklatura fullerenów** opisująca wszystkie operacje konieczne do nazwania policyklicznych węglowych związków klatkowych i ich pochodnych. Terminem nomenklatura opisuje się rodziny związków naturalnych, na przykład **nomenklatura produktów naturalnych,** która bazuje na koncepcji stereorodzica. Nomenklatura węglowodanów, α-aminokwasów, peptydów, lipidów i innych związków o znaczeniu biochemicznym jest zazwyczaj uważana za **nomenklaturę biochemiczną** i jako taka jest publikowana wyczerpująco oddzielnie.

P-15.1 NOMENKLATURA PODSTAWNIKOWA

Nomenklatura podstawnikowa opiera się na wyborze struktury macierzystej posiadającej podstawialne atomy wodoru (patrz P-15.1.5) które są zamieniane przez znaczące nomenklaturowo fragmenty strukturalne reprezentowane albo przez przedrostki i /lub przyrostki lub tylko przez przedrostki. Nomenklatura podstawnikowa obejmuje trzy rodzaje struktur macierzystych: macierzyste wodorki, sfunkcjonalizowane macierzyste wodorki i związki o macierzystych funkcjach.

P-15.1.1 Macierzyste wodorki

Macierzyste wodorki są nierozgałęzionymi acyklicznymi, cyklicznymi lub acyklicznymi/cyklicznymi strukturami do których połączonymi wyłącznie z atomami wodoru. Mogą one mieć zachowane nazwy jak opisane w rozdziałach P-2 i P-3, semisystematyczne nazwy dla produktów naturalnych (patrz P-101) lub nazwy otrzymane systematycznymi metodami opisanymi w rozdziałach P-2 i P-3.

Przykłady: metan (PIN; nazwa zachowana, patrz P-21.1.1.1)

cykloheksan (PIN; P-22.1.1)

styren (nazwa zachowana, P-31.1.3.4); etenylobenzen (PIN)

pirydyna (nazwa zachowana, PIN; P-22.2.1)

cholestan (nazwa zachowana, Tabela 10.1.b)

Macierzyste wodorki mogą być podstawione przedrostkami i/lub przyrostkami. Pełny opis nazwy podstawnikowej jest przedstawiony schematycznie na rysunku 1.1.

Przedrostki			**Macierz**	**Końcówki**	**Przyrostki**	
Rozłączne przedrostki podstawnikowe	Rozłączne przedrostki nasycenia/ nienasycenia (hydro/dehydro)	Nierozłączne przedrostki określające strukturę	Nazwa macierzystego wodoru	Końcówki nienasycenia (an/en/yn)	Przyrostki funkcjonalne	Skumulowane przyrostki

Rys.1.1 Porządek składników w nazwach podstawnikowych wywodzących się z nazw macierzystych wodorków

P-15.1.2 Związek o macierzystych funkcjach

P-15.1.2.1 Związki o macierzystych funkcjach używane w systematycznej nomenklaturze organicznej są strukturami o zachowanych nazwach zwyczajowych sugerujących obecność co najmniej jednej grupy charakterystycznej i mające jeden lub więcej atomów wodoru przyłączonych do co najmniej jednego atomu szkieletu lub takie, w których co najmniej jedna z grup charakterystycznych może tworzyć przynajmniej jeden rodzaj modyfikacji funkcjonalnych.

Modyfikacja nazw takich związków o macierzystych funkcjach jest ograniczona, ponieważ można dodawać do niej jedynie rozłączne przedrostki i skumulowane przyrostki. Ponadto preferowanych nazw IUPAC nie można modyfikować zmianą stopnia uwodornienia przy użyciu przedrostków hydro/dehydro, przez zmianę końcówki ‘an’ na ‘en’' lub ‘yn’ ani zmieniać struktury nierozłącznymi przedrostkami takimi jak ‘cyklo’.

Przykłady: kwas octowy (PIN; P-65.1.1)
anilina (PIN; P-62.2.1.1.1)
kwas fosfonowy (nazwa wstepnie wybrana; P-67.1.1)

P-15.1.2.2 Druga grupa związków o macierzystych funkcjach jest szeroko używana w nomenklaturze produktów naturalnych, w której stosuje się nierozłączne przedrostki takie jak ‘cyklo’, ‘nor’, ‘homo’ i końcówki ‘en’, ‘yn’ itd. jak opisano w rozdziale P-10.

Przykłady: D-glukoza (Tabela 10.2)

alanina (Tabela 10.4)

Pełną preferowaną podstawnikową nazwę IUPAC utworzoną na podstawie nazwy związku o macierzystych funkcjach można przedstawić schematycznie tak jak na rys. 1.2.

Rozłączne przedrostki podstawnikowe	Nazwa związku o macierzystych funkcjach	Skumulowane przyrostki

Rys. 1.2 Porządek składników w nazwie podstawnikowej wywodzącej się z nazwy związku o macierzystych funkcjach

P-15.1.2.3 Nazwa sfunkcjonalizowanego macierzystego wodorku jest nazwą macierzystego wodorku podstawioną przyrostkiem grupy charakterystycznej, na przykład etanoamina (patrz P-62.2.1.2) i cykloheksanol (patrz P-63.1.2) i nie należy jej mylić z nazwą związku o macierzystych funkcjach.

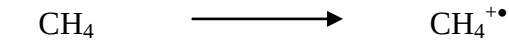
P-15.1.3 Przyrostki (patrz także P-33)

Istnieją dwa rodzaje przyrostków, funkcjonalne i skumulowane.

(1) Przyrostki funkcjonalne są zazwyczaj prostymi przyrostkami używanymi do opisu grup charakterystycznych wskazujących klasy. Na przykład , klasy ketonów, kwasów, amin i estrów wskazywane są, odpowiednio, przyrostkami –on, kwas –karboksylowy, -amina i –karboksylan. Przyrostki funkcjonalne są zastrzeżone, ponieważ obecność jednego przyrostka wskazującego główną grupę charakterystyczną wyklucza obecność inneych grup charakterystycznych, które muszą być wskazywane przyrostkami.

(2) Przyrostki skumulowane używane są do wskazywania jonów, rodników, rodniko-jonów i pokrewnych rodzajów, na przykład –yl, -ium, -id (-yd), a także podstawników. Przyrostki skumulowane nie są zastrzeżone. Mogą być łączone ze sobą a także z przyrostkami funkcjonalnymi, na przykład –aminyl, nitrylium, sulfaniumyl.

Przykłady:



metan (PIN) (wodorek macierzysty) — metaniumyl (PIN) (‘iumyl’ jest przyrostkiem skumulowanym)

etan (PIN) (wodorek macierzysty) — etanoamina (PIN) (‘amina’ jest przyrostkiem funkcjonalnym) — etanoaminium (PIN) (‘aminium’ jest przedrostkiem skumulowanym)

P-15.1.4 Pozycja końcówek ‘an’, ‘en’ i ‘yn’

Modyfikacja końcówek ‘an’ na ‘en’ i ‘yn (in)’ w acyklicznych i policyklicznych wodorkach macierzystych jest stosowana do opisu operacji subtrakcji wprowadzającej wiązania podwójne i potrójne do nasyconego wodorku macierzystego. Końcówki te mogą być łączone z funkcyjnymi przyrostkami tworząc skumulowane przyrostki.

P-15.1.5 Przedrostki i ich miejsce w nazwie

Istnieją dwa rodzaje przedrostków, nierozłączne i rozłączne. Nierozłączne przedrostki opisują strukturalne modyfikacje macierzystej struktury prowadzące do nowej struktury macierzystej, na przykład przedrostki zamienne, które mogą być przedrostkami ‘a’ zamiany szkieletu (patrz P-15.4) lub przedrostkami zamiany funkcji (patrz P-15.5). Przedrostki rozłączne są dwóch rodzajów: przedrostki wskazujące nasycenie lub nienasycenie (‘hydro’ i 'dehydro'); i przedrostki wskazujące podstawienie, nazywane czasem alfabetyzowalnymi.

P-15.1.5.1 Przedrostki nierozłączne
P-15.1.5.2 Przedrostki rozłączne hydro/dehydro
P-15.1.5.3 Przedrostki rozłączne alfabetyzowalne

Nierozłączne przedrostki, rozłączne przedrostki (hydro/dehydro) i rozłączne alfabetyzowalne przedrostki wymienia się w nazwach jak pokazano na rys. 1,1 (patrz P-15.1.1)

P-15.1.5.1 Przedrostki nierozłączne

Przedrostki nierozłączne łączą się na stałe z nazwą macierzystej struktury w określonym porządku, który normalnie odzwierciedla kolejność operacji przeprowadzonych aby zmodyfikować tę strukturę. Przedrostki opisujące pierwszą operację są bezpośrednio dołączone do nazwy struktury macierzystej; te wynikające z drugiej operacji umieszcza się przed wprowadzonymi poprzednio, i tak dalej (technikę taką można nazwać ‘posuwaniem się od tyłu’ od nazwy struktury macierzystej). Kolejność jest dokładnie ustalona dla każdej kategorii, jak pokazano poniżej.

P-15.1.5.1.1 Przedrostki nierozłączne tworzące nowe struktury macierzyste:

(a) alicykliczne pierścienie i układy pierścieniowe za pomocą takich przedrostków jak : ‘cyklo’ ,’bicyklo’, ‘ tricyklo’itd.; ‘spiro’, ‘dispiro’ itd.
(b) skondensowane układy pierścieniowe przedrostkami : ‘benzo’, ‘nafto’, ‘imidazo’ itd.
(c) skondensowane mostkowe układy pierścieni przez dodatek przedrostków dla mostków: ‘metano’, ‘epoksy’ itd.
(d) związki spiranowe wytworzone przez łączenie nazw związków cyklicznych w (a), (b) i/lub (c)

P-15.1.5.1.2 Zastąpienie atomów różnych od atomu wodoru innymi atomami.

Ten typ zamiany nazywany ‘zamianą szkieletu’ jest zazwyczaj zamianą atomu węgla na heteroatom; ma zastosowanie do acyklicznych i cyklicznych węglowodorów i prowadzi do nowej struktury macierzystej, zamianę wskazuje się przedrostkami ‘a’: ‘oksa’, ‘aza’, ‘tia’ itd.

P-15.1.5.1.3 Wskazany atom wodoru (patrz P-14.7) jest także nierozłącznym przedrostkiem i wprowadza się go przed wszystkimi innymi nierozłącznymi przedrostkami.

P-15.1.5.2 Rozłączne przedrostki hydro/dehydro.

Te dwa przedrostki wprowadza się do nazw operacjami addytywną lub subtraktywną; tak więc nie mieszczą się one w kategorii rozłącznych alfabetyzowalnych przedrostków wskazujących podstawienie (P-15.1.5.3). W nazwach zajmują miejsce pomiędzy przedrostkami nierozłącznymi i rozłącznymi przedrostkami alfabetyzowalnymi. Przedrostki te wyrażają modyfikacje stopnia uwodornienia pierścienia lub układu pierścieniowego o maksymalnej liczbie nieskumulowanych wiązań podwójnych (struktura mancude) i numeruje się je jak końcówki 'en' i 'yn (in)', spełniające tą samą rolę. W nazwach przedrostek 'dehydro' wyprzedza 'hydro', o ile oba występują w nazwie. Z 'hydro' i 'dehydro' stosuje się proste człony liczbowe, takie jak 'di', 'tri', 'tetra' itd.

P-15.1.5.3 Rozłączne przedrostki alfabetyzowalne

Do przedrostków tych należą podstawniki wskazujące grupy charakterystyczne, które nie są główną grupą charakterystyczną ani grupami utworzonymi z macierzystych wodorków , i wymienia się je przed przedrostkami 'hydro/dehydro', o ile są obecne (patrz P-31.2) lub nierozłącznymi przedrostkami o ile są obecne, jak pokazano na rys. 1.1. Są one alfabetyzowane w zgodzie z P-14.5.

P-15.1.6 Inne składniki nazw podstawnikowych

Oprócz składników opisanych powyżej, dodaje się, w miarę potrzeby, inne wskaźniki nomenklaturowe.

P-15.1.6.1 Przedrostki zwielokrotniające, umieszczane przed przyrostkami i przedrostkami, wskazujące wielokrotne podstawienie.

P-15.1.6.2 Lokanty wskazujące w macierzystej strukturze pozycje, w których mają miejsce modyfikacje opisane przyrostkami, przedrostkami i końcówkami.

P-15.1.6.3 Stereodeskryptory umieszczane na początku pełnej nazwy lub fragmentu nazwy do których się odnoszą (patrz P-9).

P-15.1.7 Tworzenie nazw podstawnikowych

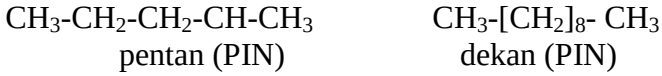
Podrozdział ten opisuje tworzenie nazw podstawnikowych i zastosowanie czterech ogólnych zestawów reguł odnoszących się do numerowania (P-14.4), lokantów (P-14.3), przedrostków zwielokrotniających (P-14.2) i porządku alfanumerycznego (P-14.5). Te cztery zestawy reguł stosuje się przy tworzeniu nazw większości związków organicznych. Pierwszy zestaw przykładów pokazuje alkany i rozgałęzione alkany. W drugim pokazane są ogólne zasady numerowania na przykładzie modelowych nasyconych i nienasyconych związków acyklicznych, pokazane w przyrostkach. Cała procedura tworzenia nazwy jest opisana w P-45.

P-15.1.7.1 Nazywanie alkanów i rozgałęzionych alkanów

P-15.1.7.1.1 Nazwy alkanów są albo nazwami zachowanymi, metan, etan, propan i butan; lub nazwami tworzonymi systematycznie przez dodanie końcówki 'an' do podstawowego przedrostka zwielokrotniającego, z usunięciem końcowego 'a' członu zwielokrotniającego (patrz P-2).

Przykłady:

CH_4	CH_3-CH_3	CH_3-CH_2-CH_3	CH_3-CH_2-CH_2-CH_3
metan (PIN)	etan (PIN)	propan (PIN)	butan (PIN)

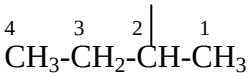


pentan (PIN) dekan (PIN)

P-15.1.7.1.2 Monowalencyjne proste przedrostki podstawnikowe utworzone z nierozgałęzionych acyklicznych weglowodorów (alkanów) w wyniku usunięcia jednego atomu wodoru z krańcowego atomu węgla (operacja subtrakcji) nazywa się zamieniając końcowe ‘an’ nazwy węglowodoru na ‘yl’ (patrz P-20.3.2.1) lub, jeżeli atom wodoru został usunięty z nie-krańcowego atomu węgla dodając ‘-yl’ do nazwy węglowodoru (patrz P-29.3.2.2) (‘-yl’ jest przyrostkiem kumulacyjnym, patrz rys.1.1, P-15.1.1).

Przykłady:

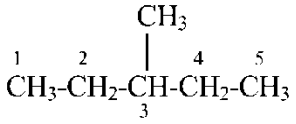
butyl (preferowany przedrostek) pentyl (preferowany przedrostek)



butan-2-yl (preferowany przedrostek)

P-15.1.7.1.3 Nasycony rozgałęziony węglowodór łańcuchowy powstaje przez podstawienie jednego lub więcej podstawników , utworzonych jak opisano w P-15.1.7.1.2, do najdłuższego łańcucha w strukturze (operacja podstawienia); nazywa się go dodając przedrostek utworzony jak w P-15.1.7.1.2, do nazwy najdłuższego łańcucha (patrz P-15.1.7.1.4 numerowanie)

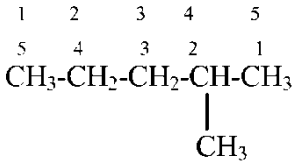
Przykład:



3-metylopentan (PIN)

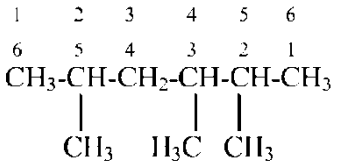
P-15.1.7.1.4 Najdłuższy łańcuch numeruje się od jednego krańca do drugiego, cyframi arabskimi, kierunek numerowania wybiera się tak, aby przypisać możliwie najniższe lokanty podstawnikom (bocznym łańcuchom) [patrz P-14.4(f)]. Niższy zestaw lokantów definiuje się jako zestaw, który porównywany znak po znaku z innym zestawem lokantów wymienianym w kolejności od najniższych do najwyższych, ma niższy lokant w pierwszym miejscu różnicy (patrz P-14.3.5). Lokanty umieszcza się bezpośrednio przed częścią nazwy do której się odnoszą. Identyczne proste podstawniki wskazuje się przedrostkami zwielokrotniającymi takimi jak ‘di’, ‘tri’ etc. [P-16.3.3 (b)]. Dla zespolonych lub kompleksowych podstawników (patrz P-29.4 i P-29.5) stosuje się przedrostki zwielokrotniające ‘bis’, ‘tris’, ‘tetrakis’ etc. (P-14.2.2) jak opisano w P-16.3.5 (a).

Przykłady:



nieprawidłowe numerowanie
prawidłowe numerowanie

2-metylopentan (PIN)

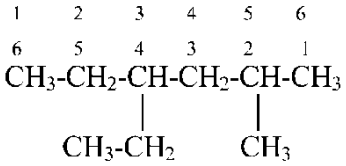


nieprawidłowe numerowanie
prawidłowe numerowanie

2,3,5-trimetyloheksan (PIN)
(nie 2,4,5-trimetyloheksan; zestaw lokantów 2,3,5 jest niższy od 2,4,5)

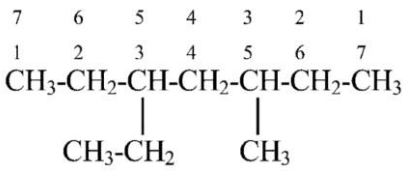
P-15.1.7.1.5 Jeżeli obecne są dwa lub większa liczba podstawników, wymienia się je w nazwie w kolejności alfanumerycznej (patrz P-14.5). Jeżeli dwa lub większa liczba podstawników zajmują równoważne pozycje , niższy lokant otrzymuje grupa wymieniana pierwsza w nazwie.

Przykłady:



nieprawidłowe numerowanie
prawidłowe numerowanie

4-etylo-2-metyloheksan (PIN)
(nie 3-etylo-5-metyloheksan; zestaw lokantów 2,4 jest niższy od 3,5)



nieprawidłowe numerowanie
prawidłowe numerowanie

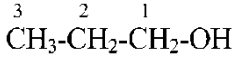
3-etylo-5-metyloheptan (PIN)
(nie 5-etylo-3-metyloheptan; niższy lokant musi być przypisany podstawnikowi wymienianemu jako pierwszy)

P-15.1.7.2 Reguły numerowania

Przytoczone przykłady ilustrują reguły numerowania opisane w P-14.4. Reguła ta ustala porządek pierwszeństwa wśród różnych cech nomenklaturowych dla przypisania mozliwie najniższych lokantów.

P-15.1.7.2.1 Alkohole nazywa się dodając przyrostek ‘-ol’ do nazwy macierzystego wodorku. Jeżeli strukturze obecna jest jedna grupa charakterystyczna to musi ona otrzymać najniższy możliwy lokant, który umieszcza się bezposrednio przed przyrostkiem (P-14.3.2).

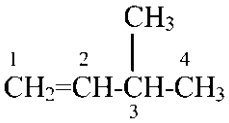
Przykłady:



propan-1-ol (PIN)

P-15.1.7.2.2 Alkeny są acyklicznymi rozgałęzionymi lub nierozgałęzionymi węglowodorami mającymi jedno podwójne wiązanie. Jeżeli jest jedno podwójne wiązanie, nierozgałęziony alken nazywa się zamieniając końcówkę '-an' w nazwie alkanu o tej samej liczbie atomów węgla na '-en' (patrz P-31.1). Podwójne wiązanie otrzymuje możliwie najniższy lokant, który umieszcza się bezpośrednio przed końcówką '-en' (patrz P-14.3.2).

Przykład:



but-1-en (PIN)

P-15.1.7.2.3 Kiedy w strukturze występuje kilka cech nomenklaturowych, najniższe lokanty przypisuje się zgodnie z P-14.4. Na przykład w cyklicznym nienasyconym alkoholu z jednym podstawnikiem, najniższe lokanty przypisuje się w kolejności:

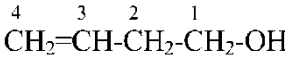
(a) grupa charakterystyczna wskazywana przyrostkiem (-ol);

(b) nienasycenie (np. końcówka –en);

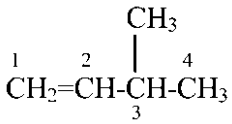
(c) rozłączne, alfabetyzowalne przedrostki (w tym przypadku metyl)

Przytoczone przykłady ilustrują zastosowanie tej reguły.

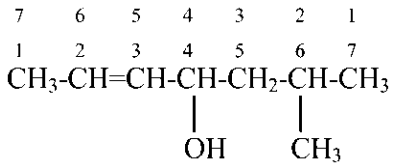
Przykłady:



but-3-en-1-ol (PIN)



3-metylobut-1-en (PIN)



numerowanie nieprawidłowe

numerowanie prawidłowe

6-metylohept-2-en-4-ol (PIN)
(nie 2-metylohept-5-en-4-ol)

P-15.1.8 Reguły podstawiania struktur macierzystych o zachowanych nazwach

Omawiane tu reguły opisują podstawialność struktur macierzystych o zachowanych nazwach podanych w P-22.1.2, P-22.1.3, tabelach 2.2, 2.3, 2.7, 2.8, tabelach 3.1, 3.2 i dla związków o macierzystych funkcjach podanych w P-34. Nie stosuje się ich do funkcjonalnych związków

macierzystych występujących w nomenklaturze związków naturalnych (patrz rozdział P-10), dla których obowiązują specyficzne reguły.

P-15.1.8.1 Typ 1 Nieograniczone podstawienie podstawnikami wskazywanymi zarówno przedrostkami jak i przyrostkami; dotyczy to głównie macierzystych wodorków.

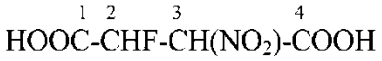
P-15.1.8.2 Typ 2 Ograniczone podstawienie uogólnione jak niżej:
Typ 2a Podstawienie ograniczone do podstawników wskazywanych przedrostkami zgodnie ze starszeństwem grup funkcyjnych wyraźnie wyrażonym lub implikowanym w nazwie związku o macierzystych funkcjach;
Typ 2b Podstawienie ograniczone do podstawników, które muszą być wskazane przedrostkami;
Typ 2c Podstawienie struktur macierzystych nie objętych typami 2a i 2b.

P-15.1.8.3 Typ 3 Dozwolne podstawienie każdego rodzaju.

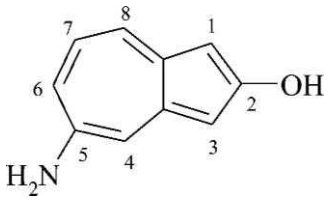
P-15.1.8.1 Reguły podstawienia dla zachowanych nazw 1 Typu

Zachowane nazwy Typu 1 dla wodorków macierzystych opisanych w rozdziałach P-2 i P-3 mają nieograniczone podstawienie podstawnikami wskazywanymi zarówno jako przedrostki jak i przyrostki.

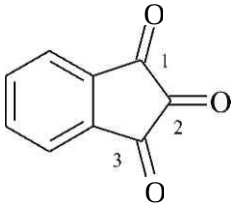
Przykłady:



kwas 2-fluoro-3-nitrobutanodiowy (PIN)
(butan jest nazwą zachowaną)



5-aminoazulen-2-ol (PIN, azulen jest nazwą zachowaną)
(nie 2-hydroksyazuleno-5-amina)



indano-1,2,3-trion
1*H*-indeno-1,2,3-trion (PIN)

P-15.1.8.2 Reguły podstawienia dla zachowanych nazw Typu 2

Podstawienie macierzystych wodorków o zachowanych nazwach i związków o macierzystych funkcjach których nazwy wyraźnie lub w domyśle wyrażają obecność grupy funkcyjnej normalnie

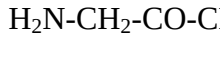
wskazywanej przyrostkiem, takim jak '–on', lub klasy fukcyjnej, takiej jak 'eter' jest ograniczone w różny sposób jak opisano w kolejnych podrozdziałach. Reguły podstawiania nieorganicznych okso-kwasów jako związków o macierzystych funkcjach i struktur macierzystych opisane są w P-67.

P-15.1.8.2.1 Reguły podstawienia dla zachowanych nazw Typu 2a

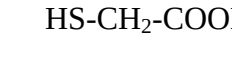
Zachowane nazwy Typu 2a dotyczą związków o macierzystych funkcjach, których nazwy wyrażają lub implikują obecność grupy charakterystycznej wskazywanej przyrostkiem w nazwach systematycznych.

P-15.1.8.2.1.1 Dozwolone jest podstawienie podstawnikiem wskazywanym przedrostkiem o niższym starszeństwie niż cechujące przyrostek.

Przykłady:



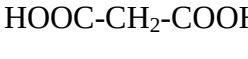
aminoacetone
1-aminopropan-2-on (PIN)



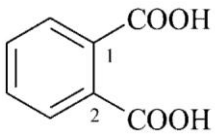
kwas sulfanylooctowy (PIN)

Przyrostek wyraźnie lub domyślnie obecny nie może być wskazany przedrostkiem:

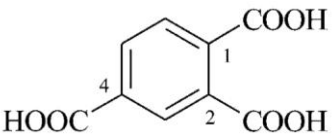
Przykłady:



kwas propanodiowy (PIN)
kwas malonowy
(nie kwas 2-karboksyoctowy)



kwas benzeno-1,2-dikarboksylowy (PIN)
kwas ftalowy
(nie kwas 2-karboksybenzoesowy)



kwas benzeno-1,2,4-trikarboksylowy
(nie kwas 2,4-dikarboksybenzoesowy;
nie kwas 4-karboksyftalowy)

P-15.1.8.2.2 Reguły podstawienia dla zachowanych nazw Typu 2b

Zachowane nazwyTypu 2b stosuje się dla związków macierzystych wyraźnie lub w domyśle pozbawionych przyrostków: na przykład acetylen (PIN) i allen. Podstawienie tych związków macierzystych jest możliwe tylko przy użyciu specjalnie wyznaczonych przedrostków.

Grupy charakterystyczne które mogą być użyte do podstawiania struktur macierzystych typu 2b (pierścieni i łańcuchów bocznych w miarę potrzeby): halogenki –Br, -Cl, -F, -I, pseudohalogenki, $-N_3$, -NCO- (i analogi chalkogenowe), -NC, podstawniki utworzone z halogeno okso-kwasów –ClO, $-ClO_2$, $-ClO_3$ (podobnie grupy w których Cl jest zastąpiony przez Br- lub I-), $-NO_2$ i –NO, OR (R = alkil) i chalkogenowe analogi i –SO-R oraz SO_2R a także ich analogi Se i Te .

Przykłady:

Br-C≡C-H	$\overset{1}{Cl}\text{-}\overset{2}{C}H=\overset{3}{C}=CH\text{-}Cl$
bromoacetylen bromoetyn (PIN)	1,3-dichloroallen 1,3-dichloropropa-1,2-dien (PIN)

P-15.1.8.2.3 Reguły podstawienia dla zachowanych nazw Typu 2c

Zachowane nazwy Typu 2c są nazwami związków o macierzystych funkcjach, które nie należą do Typu 2b, na przykład, hydroksyloamina (patrz P-68.3.1.1.1), kwas mrówkowy (patrz P-65.1.8) i anizol (patrz P-34.1.1.4).

Przykłady:

$H_2N\text{-}O\text{-}CH_3$	HS-CO-OH
O-metylohydroksyloamina (PIN) [nie metoksyamina (patrz P-68.3.1.1.1.2)]	*S*-kwas karbonotiowy (PIN) [nie kwas sulfanylomrówkowy (patrz P-65.1.8.1)]

P-15.1.8.3 Reguły podstawienia dla zachowanych nazw Typu 3

Dla zachowanych nazw macierzystych wodorków i związków o macierzystych funkcjach Typu 3 niedopuszczalne jest żadnego rodzaju podstawienie. Jednakże dozwolone jest funkcjonalizowanie grup charakterystycznych takie jak tworzenie estrów, bezwodników i soli.

Przykłady:

$Cl\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}COOH$	$\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}CO\text{-}O\text{-}CH_2\text{-}CH_3$
kwas 3-chloropropanowy (PIN) (nie kwas 3-chloropropionowy	propanian etylu (PIN) propionian etylu

P-15.2 NOMENKLATURA KLASOWO-FUNKCYJNA

P-15.2.0 Wprowadzenie

Nomenklatura klasowo-funkcyjna była szczególnie ważna w początkach chemii organicznej, kiedy wiele związków nazywanych było z użyciem nazw klasowych. Procedura tworzenia tych nazw była identyczna ze stosowaną w nomenklaturze podstawnikowej z wyjątkiem tego, że nigdy nie używano przyrostków. We wczesnej nomenklaturze podstawniki nazywane 'rodnikami' używane były w połączeniu z nazwą określającą klasę. Ta nomenklatura nosiła nazwę nomenklatury 'rodnikowo-funkcyjnej'. Z czasem nomenklatura podstawnikowa zastąpiła, z wyjątkiem niewielu przypadków, nomenklaturę klasowo-funkcyjną. W związku z wprowadzeniem preferowanych nazw IUPAC nomenklatura podstawnikowa stała się podstawową metodą nazywania związków organicznych; nomenklatura klasowo-funkcyjna jest ograniczona do ścisłego minimum.

Pojęcie nomenklatury klasowo-funkcyjnej jest również stosowane dla związków nazywanych z użyciem nazwy klasy, ale niekoniecznie poprzedzonej nazwą podstawnika. W tym przypadku zmianę funkcji wskazuje się za pomocą jej ‘modyfikatorów funkcji’. Na przykład, zamianę kwasu w bezwodnik jak w bezwodniku octowym lub utworzenie pochodnych ketonów, na przykład, oksym butan-2-onu.

Dogodnie jest uznać główną operację związaną z nomenklaturą klasowo-funkcyjną jako addytywną, tak jak to zrobiono w P-13.3.3.2. Jednakże możliwe jest również (i prawdopodobnie bardziej uzasadnione z historycznego punktu widzenia) potraktowanie jej jako określanie podstawników ('rodniki') występujących w związkach, którym nadano nazwę klasy. Na przykład, nazwa 'alkohol metylowy' (dla CH_3OH) zawiera nazwę ‘metyl’ podstawnika CH_3- i nazwę klasy ‘alkohol’ (dla R-OH).

Nomenklatura klasowo-funkcyjna dyskutowana jest w relacji do tradycyjnego używania nazw podstawników i stosowania modyfikatorów funkcji Niektóre nazwy tworzy się na podstawie nazw klasowych, ale nie są one uznawane za należące do nomenklatury klasowo-funkcyjnej. Takie nazwy określa się jako ‘opisowe’, na przykład, ‘ester metylowy kwasu propionowego’, i nigdy nie są uznawane jako preferowane nazwy IUPAC.

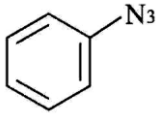
P-15.2.1 Nomenklatura klasowo- funkcyjna z użyciem nazw podstawników
P-15.2.2 Nomenklatura klasowo- funkcyjna z użyciem modyfikatorów funkcji
P-15.2.3 Starszeństwo klas funkcyjnych
P-15.2.4 Związki polifunkcyjne

P-15.2.1 Nomenklatura klasowo-funkcyjna z użyciem nazw podstawników

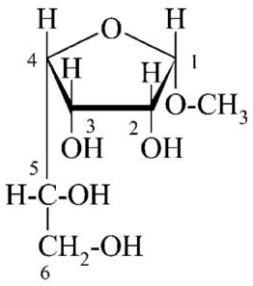
P-15.2.1.1 Nazwę klasowo-funkcyjną tworzy się przez wyrażenie, jednym słowem, nazwy klasowo-funkcyjnej związku i reszty jego molekuły jako nazwy grupy monowalencyjnej, osobnym słowem umieszczanym za nazwą klasy. Preferowane klasowo-funkcyjne nazwy IUPAC ograniczone są do estrów (patrz P-65.6.3.2), haloidków acyli (patrz P-65.5.1) i pseudohaloidków (patrz P-65.5.2). Glikozydy alkili nazywa się również za pomocą nazw klasowo-funkcyjnych, które zaliczone są do nazw przyjętych w nomenklaturze węglowodanów (patrz P-102.5.6.2).

Przykłady:

CH_3-CH_2-CO-O-CH_3	propanian metylu (PIN)
CH_3-CO-Cl	chlorek acetylu (PIN)
C_6H_5-CO-CN	cyjanek benzoilu (PIN)
C_6H_5-CH_2-NCS	izotiocyjanian benzylu (izotiocyjanianometylo)benzen (PIN)
C_6H_5-NC	izocyjanek fenylu izocyjanobenzen (PIN)
CH_3-OH	alkohol metylowy metanol (PIN)



azydek fenylu
azydobenzen (PIN)



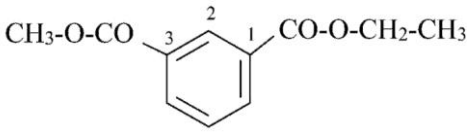
α-D-gulofuranozyd metylu

P-15.2.1.2 Kiedy nazwa klasowo-funkcyjna odnosi się do diwalencyjnej grupy charakterystycznej, wymienia się oba przyłączone do niej podstawniki. W przypadku gdy są one takie same, używa się odpowiedni przedrostek liczbowy. Gdy są różne pisze się je jako odrębne słowa połączone łącznikiem, w porządku alfanumerycznym, dodając w miarę potrzeby lokanty.

Przykłady:

H_3C-O-CO-CH_2-CH_2-O-CO-CH_3 butanodian dimetylu (PIN)
bursztynian dimetylu

H_3C-CO-O-CH_2-CH_2-O-CO-CH_3 dioctan etano-1,2-diylu (PIN)
dioctan etylenu



benzeno-1,3-dikarboksylan etylu-metylu (PIN)

CH_3-CH_2-CO-CH_2-CH_3 keton dietylowy
pentan-2-on (PIN)

CH_3-CH_2-CO-CH_3 keton etylowo-metylowy
(nie keton metylowo-etylowy)
butan-2-on (PIN)

P-15.2.2 Nomenklatura klasowo- funkcyjna z użyciem modyfikatorów funkcji

Wiele pochodnych głównych grup charakterystycznych lub związków o macierzystych funkcjach (patrz P-34) można nazywać za pomocą modyfikatorów składających się z jednego lub więcej osobnych słów umieszczanych przed nazwą macierzystej struktury. Metoda ta jest szczególnie użyteczna do indeksowania i jest jedyną używaną metodą do nazywania acyklicznych bezwodników (patrz P-65.7.1), *N*-tlenków, sulfidów, selenidów i tellurydów (patrz P-63.2.5) w kontekście preferowanych nazw IUPAC.

Przykłady:

CH_3-CO-O-CO-CH_3 bezwodnik octowy (PIN)
(określenie ‘kwas’ zostało zastąpione przez ‘bezwodnik’)

$(CH_3)_3NO$	*N*-oksyd *N*,*N*-dimetylometanoaminy (PIN) *N*-tlenek *N*,*N*-dimetylometanoaminy *N*-tlenek trimetyloaminy *N*-oksyd trimetyloaminy (nazwa tradycyjna, ale bez podstawienia) *N*-tlenek trimetyloazanu *N*-oksyd trimetyloazanu

Modyfikatory funkcji są nadal akceptowane do celów ogólnej nomenklatury, ale preferowane nazwy IUPAC azyn, oksymów, hydrazonów, semikarbazonów, karbohydrazonów, acetali i hemiacetali są nazwami podstawnikowymi.

Przykłady:

CH_3-CH_2-CH=N-OH	oksym propanalu (określenie 'oksym' dodane jest do nazwy związku karbonylowego) *N*-propylidenohydroksyloamina (PIN)
CH_3-CH_2-CH=N-NH_2	hydrazon propanalu propylidenohydrazyna (PIN)
$(CH_3)_2$C=N-NH-CO-NH_2	semikarbazon acetonu 2-(propano-2-ylideno)hydrazyno-1-karboksyamid (PIN)
CH_3-CH_2-CH(O-CH_3)$_2$	acetal dimetylowy propanalu 1,1-dimetoksypropan (PIN)
CH_3-CH_2-CH_2-CO-OCH_3	ester metylowy kwasu butanowego

P-15.2.3 Starszeństwo klas funkcyjnych

Kiedy występują dwie klasy i obie nazywane są za pomocą nomenklatury klasowo-funkcyjnej należy wybrać klasę starszą, zgodnie z porządkiem starszeństwa (patrz P-41). Odnośny porządek dla preferowanych nazw IUPAC jest następujący: bezwodniki, estry, haloidki acyli. Porządek starszeństwa haloidków i pseudohaloidków omówiony zostanie w P-65.5. Starszą klasę określa się według nomenklatury klasowo-funkcyjnej, a niżej lokującą się przedrostkami, umieszczanymi jak zwykle, w części nazwy utworzonej za pomocą nomenklatury podstawnikowej.

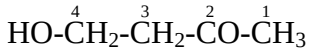
Przykłady:

Cl-$\overset{4}{C}$O-CH_2-CH_2-$\overset{1}{C}$O-O-CH_3	Cl-CH_2-OH
4-chloro-4-oksobutanian metylu (PIN) 3-(chlorokarbonylo)propanian metylu 3-karbonochlorydoilopropanian metylu	alkohol chlorometylowy chlorometanol (PIN) (alkohol jest starszy niż haloidek)
NC-$\overset{2}{C}$$H_2$-$\overset{1}{C}$O-Cl	CH_3O-$\overset{4}{C}$$H_2$-$CH_2$-$CH_2$-$\overset{1}{C}$O-O-$CH_3$
chlorek cyjanoacetylu (PIN) (chlorek acylu jest starszy niż nitryl)	4-metoksybutanian metylu (PIN) (ester jest starszy niż eter)

P-15.2.4 Związki polifunkcyjne

Nie zaleca się nazw klasowo-funkcyjnych dla związków polifunkcyjnych. Preferowana jest dla nich nomenklatura podstawnikowa.

Przykład:



4-hydroksybutan-2-on (PIN; nazwa podstawnikowa)
keton 2-hydroksyetylowo-metylowy (nazwa klasowo-funkcyjna)

P-15.3 NOMENKLATURA MULTIPLIKACYJNA

P-15.3.0 Wprowadzenie
P-15.3.1 Ogólna metodologia
P-15.3.2 Tworzenie nazwy multiplikacyjnej
P-15.3.3 Identyczne jednostki strukturalne połączone przez niesymetryczne grupy multiplikacyjne
P-15.3.4 Ograniczenia nomenklatury multiplikacyjnej

P-15.3.0 Wprowadzenie

Nomenklatura multiplikacyjna używana jest do nazywania zespołów identycznych struktur macierzystych. Występują dwa jej podzbiory:

(1) Podzbiór nomenklatury podstawnikowej, w którym identyczne jednostki strukturalne są połączone przez di- lub poliwalencyjne podstawniki (patrz P-15.3.1);

(2) Podzbiór nomenklatury klasowo- funkcyjnej, w którym identyczne jednostki strukturalne połączone są przez di- lub poliwalencyjne nie kwasowe reszty (ten podzbiór jest używany tylko do nazywania estrów, patrz P-65.6.3.2, i prowadzi do nazw takich jak ‘dioctan etano-1,2-diylu’ dla $CH_3COO\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}OCOCH_3$).

W podzbiorze nomenklatury multiplikacyjnej stanowiącej podzbiór nomenklatury podstawnikowej, dwie lub więcej identycznych jednostek, na przykład struktur macierzystych, połączonych przez di- lub poliwalencyjne podstawniki (nazywane ‘multiplikacyjnymi atomami lub grupami’ albo ‘łączącymi atomami lub grupami’) może być nazywane na dwa sposoby:

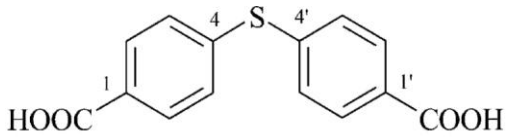
(a) nomenklaturą multiplikacyjną, w której dwie lub więcej macierzystych struktur łączy się przez symetryczny lub niesymetryczny pojedynczy lub powiązany podstawnik;

(b) nomenklaturą podstawnikową (patrz P-15.1), w której jedna ze struktur macierzystych wybrana jest jako starsza struktura macierzysta a pozostała struktura wyrażona przedrostkami opisującymi podstawniki.

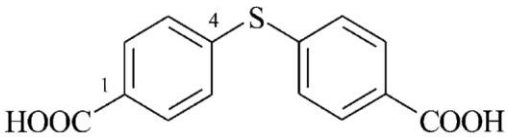
Na przykład, przedstawiony poniżej związek, za pomocą nomenklatury multiplikacyjnej, może być nazwany: kwas 4,4'-sulfanodiylodibenzoesowy (PIN) [numeracja pokazana jest na wzorze (**I)]**, nazwa ta uwzględnia obie grupy kwasu benzoesowego w nazwie struktury macierzystej.

Alternatywą jest nazwa: kwas 4-[(4-karboksyfenylo)sulfanylo)benzoesowy utworzona za pomocą nomenklatury podstawnikowej [numeracja pokazana jest ma wzorze (**II**)]; uwzględnia ona tylko

jedną grupę kwasu benzoesowego w nazwie struktury macierzystej; druga grupa kwasu benzoesowego wyrażona jest jako przedrostek.



(I)



(II)

W tej sekcji omówione są ogólne zasady tworzenia nazw multiplikacyjnych. Reguły stosowania nomenklatury multiplikacyjnej do tworzenia preferowanych nazw IUPAC są podane w P-51.3.

Nomenklatura multiplikacyjna obecnie rozszerzona jest na cykliczne struktury z lub bez grup charakterystycznych; łańcuchy utworzone tylko z atomów węgla są nadal wyłączone. W dawnych zaleceniach nomenklatura multiplikacyjna była ograniczona do związków z grupami charakterystycznymi wyrażonymi jako przyrostki lub wynikającymi z zachowanej nazwy oraz do heterocyklicznych macierzystych wodorków. Teraz ten system został rozszerzony dopuszczając podstawienie na centralnej jednostce grupy multiplikującej (P-15.3.1.2.1.2) i użycie, w określonych warunkach, niesymetrycznej jednostki centralnej (P-15.3.3.1)

P-15.3.1 Ogólna metodologia

P-15.3.1.1 Identyczne struktury macierzyste
P-15.3.1.2 Podstawniki multiplikacyjne
P-15.3.1.3 Tworzenie nazwy multiplikacyjnej

P-15.3.1.1 Identyczne struktury macierzyste

W nomenklaturze multiplikacyjnej występują cztery typy identycznych struktur macierzystych:

(a) cykliczne macierzyste wodorki ‘mancude’ lub nasycone;
(b) mononuklearne lub polinuklearne acykliczne wodorki macierzyste z wyjątkiem nasyconych i nienasyconych węglowodorów;
(c) cykliczne i acykliczne wodorki macierzyste podstawione grupami charakterystycznymi wyrażonymi jako przyrostki, na przykład, sfunkcjonalizowane macierzyste wodorki (patrz P-15.1.2.3);
(d) funkcyjne związki macierzyste z podstawialnymi atomami wodoru, na przykład, kwas octowy albo kwas fosfonowy (patrz P-15.1.2.1).

Identyczne struktury macierzyste powinny być dołączone do multiplikacyjnych podstawników przez identyczne wiązania (pojedyncze, podwójne, potrójne) i muszą być identycznie podstawione

P-15.3.1.2 Podstawniki multiplikacyjne

Występują dwa typy podstawników multiplikacyjnych:

P-15.3.1.2.1 Proste multiplikacyjne atomy i grupy
P-15.3.1.2.2 Powiązane multiplikacyjne grupy

P-15.3.1.2.1 Proste multiplikacyjne atomy i grupy

P-15.3.1.2.1.1 Każdy poliwalencyjny podstawnik (definicja w P-29.1) może być użyty jako podstawnik multiplikacyjny jeśli łączy dwie lub więcej identycznych jednostek strukturalnych.

Przykłady:

$-CH_2-$	metylen (preferowany przedrostek) metanodiyl
-O-	oksy (wstępnie wybrany przedrostek)
-S-	sulfanodiyl (wstępnie wybrany przedrostek) tio
-OO-	peroksy (wstępnie wybrany przedrostek) (dioksy nie jest już zalecany)
-SS-	disulfanodiyl (wstępnie wybrany przedrostek) ditio
-N<	nitrylo (wstępnie wybrany przedrostek=

Przedrostka ‘nitrylo’ , -N< używa sie jako wstępnie wybranego tylko wtedy, gdy do trzech wiązań przyłącza się różne atomy; nie należy stosować go dla struktury –N=, którą obecnie nazywa się jako wstępnie wybrany przedrostek ‘azanyloyliden’.

1,4-fenylen (również izomery 1,2- i 1,3, preferowany przedrostek)

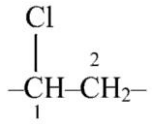
$-OC-CH_2-CH_2-CO-$	butanodioil (preferowany przedrostek) sukcynyl
$>\overset{1}{C}H_2\text{–}\overset{2}{C}H\text{–}$	etano-1,1,2-triyl (preferowany przedrostek)
$\text{–}\overset{1}{C}H\text{=}\overset{2}{C}H\text{-}\overset{3}{C}H_2\text{–}$	prop-2-eno-1,3-diyl (preferowany przedrostek)

P-15.3.1.2.1.2 Podstawienie, wyrażone przedrostkami lub domyślne, jest dopuszczalne na prostych wielowiązalnych podstawnikach, symetrycznych i niesymetrycznych, tworzą one zespolone lub kompleksowe (definicja patrz P-29.1) podstawniki wielowiązalne .

Przykłady:

ClCH<	chlorometylen (preferowany przedrostek, zespolona grupa wielowiązalna)

chlorometanyloyliden (preferowany przedrostek; zespolona grupa wielowiązalna

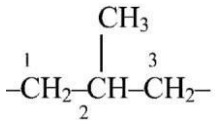


1-chloroetano-1,2-diyl (preferowany przedrostek; zespolona grupa wielowiązalna)

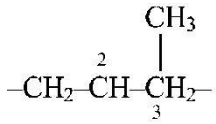
CH_3-N< metyloazanodiyl (preferowany przedrostek; zespolona grupa wielowiązalna) (nie: metyloimino)

Nazwa azanodiyl (wstępnie wybrany przedrostek) utworzona z nazwy wstępnie wybranego macierzystego wodorku ‘azan’ jest zalecana dla wielowiązalnego podstawnika –NH-; nazwa imino (także wstępnie wybrany przedrostek) jest stosowana tylko dla podstawnika =NH.

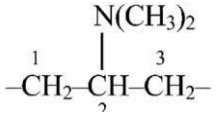
$ClCH_2P$< (chlorometylo)fosfanodiyl (preferowany przedrostek; kompleksowa wielowiązalna grupa.



2-metylopropano-1,3-diyl (preferowany przedrostek)



butano-1,3-diyl (preferowany przedrostek; patrz P-29.3.2.2)
1-metylopropano-1,3-diyl (patrz P-29.4.1)



2-(dimetyloamino)propano-1,3-diyl (preferowany przedrostek)

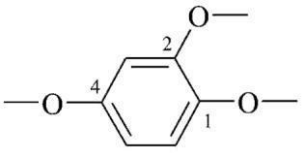
P-15.3.1.2.2 Powiązane grupy wielowiązalne

P-15.3.1.2.2.1 Powiązanie jest metodą używaną do tworzenia podstawników wieloskładnikowych di- i poliwalencyjnych wielowiązalnych. Powiązaną wielowiązalną grupę tworzy się przez wymienienie najpierw centralnego wielowiązalnego podstawnika, za nim przedrostka zwielokrotniającego takiego jak ‘di’, ‘tri’, etc. lub ‘bis’, ‘tris’, etc. a następnie w porządku i w kierunku identycznych struktur macierzystych nazw następujących po sobie di- lub poliwalencyjnych podstawników.

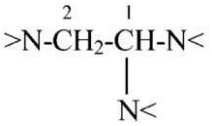
Przykłady:

-O-CH_2-O- metylenobis(oksy) (preferowany przedrostek)
[nie metylenodioksy, dioksy jest niejednoznaczne, ponieważ może oznaczać 'peroksy' albo dwukrotne 'oksy' (patrz P-15.3.1.2.1.1)]

$-CH_2-O-CH_2-$ oksybis(metylen) (preferowany przedrostek)



[benzeno-1,2,4-triylotris(oksy)] (preferowany przedrostek)



etano-1,1,2-triylotrinitrylo (preferowany przedrostek)

$-H_2C-NH-CO-CH_2-CO-NH-CH_2-$ propanodioilobis(azanodiylometylen) (preferowany przedrostek)

> **Uwaga:** Kiedy dwie lub więcej następujących po sobie wielowiązalnych grup występuje po centralnej grupie wielowiązalnej, nie otrzymują one odrębnych przedrostków zwielokrotniających. Zgodnie z tym preferowaną nazwą IUPAC w przytoczonym powyżej przykładzie NIE JEST propanodioilobis(azanodiylo)bis(metylen).

P-15.3.1.2.2.2 Kiedy poliwalencyjne podstawniki typu 'yl/yliden', nie mające lokantów i wymieniane w zalecanym porządku użyte są w wieloczęściowym podstawniku wielowiązalnym, powiązanie następuje przez dodanie monowalencyjnej wolnej wiązalności typu ‘yl’ do innej monowalencyjnej wolnej walencyjności typu ‘yl’ ('il') i podobnie dla wolnych walencyjności typu 'yliden'.

Przykłady:

-CH=N-O-N=CH- oksybis(azanyloylidenometanyloylideno) (preferowany przedrostek) [nie oksybis(nitrylomethanyloyliden]

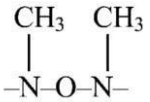
-O-N=CH-CH=N-O- etano-1,2-diylidenobis(azanyloylidenooksy) (preferowany przedrostek)

-O-N=C=N-O- metanodiylidenobis(azanyloylidenooksy (preferowany przedrostek)

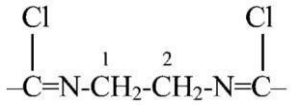
=CH-N=C=N-CH= metanodiylidenobis(azanyloylidenometanyloyliden) (preferowany przedrostek) [nie metanodiylidenobis(nitrylometanyloyliden)]

P-15.3.1.2.2.3 W powiązanym multiplikacyjnym podstawniku dopuszczalne jest podstawienie na podstawniku centralnym i na następnych pod warunkiem, że sekwencja atomów i wiązań, wychodzących z centralnego podstawnika, jest identyczna we wszystkich gałęziach.

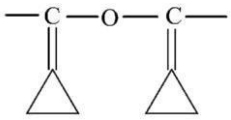
Przykłady:



oksybis(metyloazanodiyl) (preferowany przedrostek)



etano-1,2-diylobis[azanyloylideno(chlorometanyloyliden)] (preferowany przedrostek)

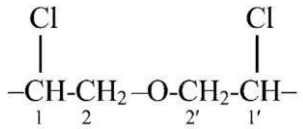


oksybis(cyklopropylidenometylen)
(preferowany przedrostek)

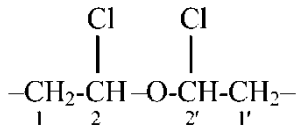
Uwaga: Podany tu preferowany przedrostek byłby niejednoznaczny gdyby przyrostek ‘yliden’ nie był ograniczony do wskazywania podwójnych wiązań (patrz P-29.2); mógłby odnosić się do struktury, w której wiązania cyklopropanu biegłyby do grupy CH_2 i atomu tlenu jako wiązania pojedyncze; taka struktura miałaby jednakże preferowaną nazwę IUPAC: oksybis(cyklopropano-1,1-diylometylen).

P-15.3.1.2.2.4 Numerowanie składników wieloczęściowego di- lub triwalencyjnego podstawnika wielowiązalnego, gdy to konieczne, osiąga się przez przypisanie najniższych lokantów atomom, które są na końcu składnika najbliższego zwielokrotnionej struktury macierzystej z wyłączeniem sytuacji kiedy ma on ustaloną numerację. Lokanty związane ze zwielokrotnioną strukturą macierzystą są wymieniane jako ostatnie. Tam gdzie nie ma wyboru, lokanty wymienia się w rosnącym porządku liczbowym.

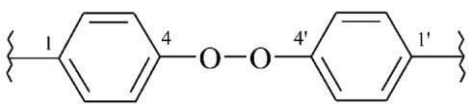
Przykłady:



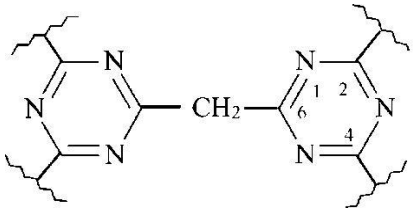
oksybis(1-chloroetano-2,1-diyl) (preferowany przedrostek)
oksybis(1-chloroetylen)



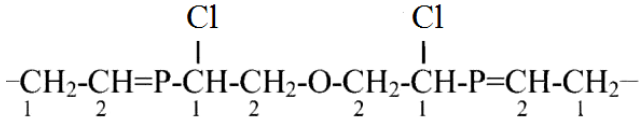
oksybis(2-chloroetano-2,1-diyl)
(preferowany przedrostek)
oksybis(2-chloroetylen)



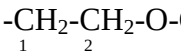
peroksydi(4,1-fenylen) (preferowany przedrostek [nie dioksydi(4,1-fenylen)]



metylenobis(1,3,5-triazyno-6,2,4- triyl)
(preferowany przedrostek

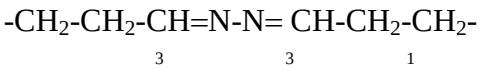


oksybis[(1-chloroetano-2,1-diylo)fosfanyloylidenoetan-1-ylo-2-yliden]
(preferowany przedrostek; numerowanie etano-1-ylo-2-yliden jest ustalone)



etano-1,2-diylobis(oksyetano-2,1-diyl)
(preferowany przedrostek)

oksydi(propan-1-ylo-3-yliden)
(preferowany przedrostek)



hydrazynodiylidenodi(propan-1-ylo-3-yliden) (preferowany przedrostek;
numerowanie propan-1-ylo-3-yliden jest ustalone)

P.15.3.1.3 Tworzenie nazwy multiplikacyjnej

Nazwy multiplikacyjne tworzone są zgodnie z liczbą obecnych identycznych jednostek strukturalnych zdefiniowanych w P-15.3.1.1 i ich relacją do łączącego podstawnika multiplikacyjnego.

Kiedy związek zawiera identyczne jednostki strukturalne zdefiniowane w P-15.3.1.1 połączone symetryczną prostą, zespoloną, kompleksową lub powiązaną multiplikacyjną grupą (di- lub poliwalencyjny podstawnik) nazywany jest przez określenie kolejno:

(a) lokantów pozycji podstawienia łączącego multiplikacyjny podstawnikowy atom lub grupę z identyczną macierzystą jednostką strukturalną (lokant 1 jest pomijany gdy występuje jako jedyny w nazwie mononuklearnego macierzystego wodorku);
(b) nazwy łączącego multiplikacyjnego podstawnikowego atomu lub grupy;
(c) przedrostków liczbowych ‘di’, ‘tri’, etc.; i/lub ‘bis-‘, ‘tris-’, etc. bez opuszczania końcowej samogłoski przed nazwą identycznej macierzystej jednostki strukturalnej;
(d) nazwy jednej z identycznych jednostek strukturalnych zawierającej główna grupę charakterystyczną i podstawniki – jeśli występują, zamknięte w odpowiednich nawiasach (patrz P-16.5).

Numeracja identycznych macierzystych jednostek strukturalnych jest zachowana, a tam gdzie

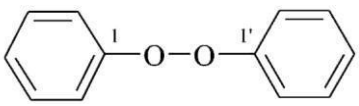
jest możliwość wyboru miejsca podstawienia przez łączące multiplikacyjne podstawniki do identycznych struktur macierzystych lokanty są możliwie najniższe.

P-15.3.2 Konstruowanie nazwy multiplikacyjnej

P-15.3.2.1 Zespoły identycznych jednostek strukturalnych (patrz P-15.3.1.1)
P-15.3.2.2 Lokanty dla atomów azotu w identycznych jednostkach strukturalnych
P-15.3.2.3 Stosowanie przedrostków zwielokrotniających ‘bis’, ‘tris’, *etc*.
P-15.3.2.4 Podstawione identyczne jednostki strukturalne (patrz P-15.3.1.1)

P-15.3.2.1 Zespoły identycznych jednostek strukturalnych (patrz P-15.3.1.1)

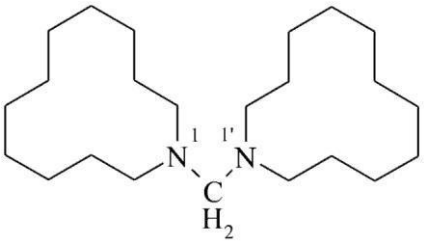
Nazwy zachowane i systematyczne mogą być używane jako identyczne macierzyste jednostki strukturalne. Dla rozróżnienia pomiędzy lokantami identycznych macierzystych jednostek strukturalnych używane są primy, podwójne primy, etc. Sfunkcjonalizowane wodorki macierzyste, to znaczy macierzyste struktury podstawione grupami wyrażanymi jako przyrostki (patrz P-15.1.2), zamyka się w nawiasach okrągłych i poprzedza przedrostkiem liczbowym ‘di’, ‘tri’, etc. Niepodstawione funkcyjne związki macierzyste poprzedzane są przedrostkami numerycznymi ‘di’, ‘tri’, etc. bez nawiasów, pod warunkiem, że nie prowadzi to do dwuznaczności, jak opisano w P-15.3.2.3. Zespolone i kompleksowe multiplikacyjne podstawniki zamykane są w nawiasach, zgodnie z potrzebą, okrągłych, kwadratowych bądź klamrowych (patrz P-16.5).
Przykłady:



1,1′-peroksydibenzen (PIN)
(nie dioksydibenzen)

$H_3\overset{1}{Si}\text{-}SiH_2\text{-}CH_2\text{-}SiH_2\text{-}\overset{1'}{Si}H_3$

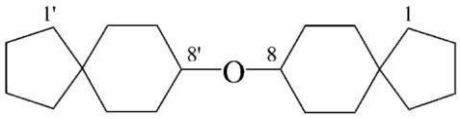
1,1′-metylenobis(disilan) (PIN)



1,1′-metylenobis(1-azacyklododekan) (PIN)

$HO\text{-}CH_2\text{-}\overset{2}{C}H_2\text{-}S\text{-}\overset{2'}{C}H_2\text{-}CH_2\text{-}OH$

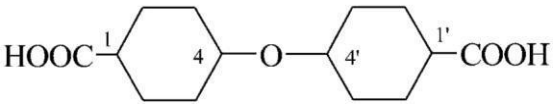
2,2′-sulfanodiylodi(etan-1-ol) (PIN)
2,2′-tiodi(etan-1-ol)



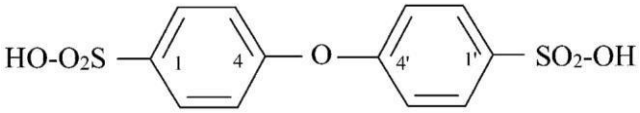
8,8′-oksydi(spiro[4.5]dekan) (PIN)

$H_3Si\text{-}[\overset{1\text{-}14}{C}H_2]_{14}\text{-}O\text{-}[\overset{14\text{-}1}{C}H_2]_{14}\text{-}SiH_3$

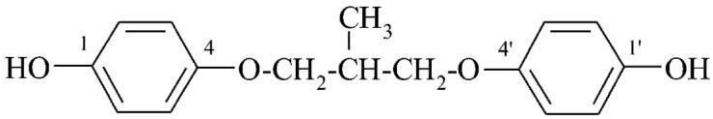
1,1′-[oksydi(tetradekano-14,1-diylo)]bis(silan) (PIN)



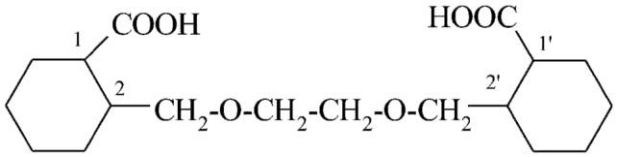
kwas 4,4′-oksydi(cykloheksano-1-karboksylowy) (PIN)



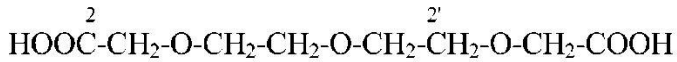
kwas 4,4′-oksydi(benzeno-1-sulfonowy (PIN)
4,4′-oksydi(kwas benzenosulfonowy)



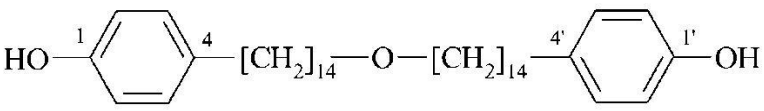
4,4′-[(2-metylopropano-1,3-diylo)bis(oksy)]difenol (PIN)



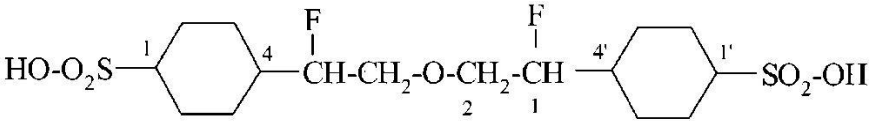
kwas 2,2′-[etano-1,2-diylobis(oksymetyleno)]di(cykloheksano-1-karboksylowy)



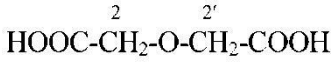
kwas 2,2′-[oksybis(etano-2,1-diyloksy]dioctowy (PIN)



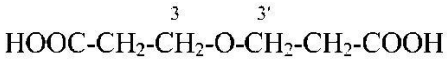
4,4′-[oksydi(tetradekano-14,1-diylo)]difenol (PIN)



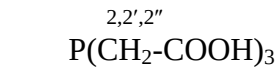
kwas 4,4′-[oksybis(1-fluoroetano-2,1-diylo)]di(cykloheksano-1-sulfonowy) (PIN)



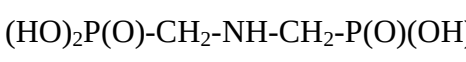
kwas 2,2′-oksydioctowy (PIN)



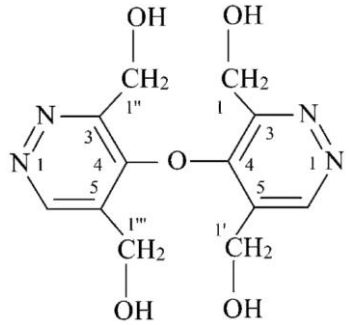
kwas 3,3′-oksydipropanowy (PIN)



kwas 2,2′,2″-fosfanotriylotrioctowy (PIN)

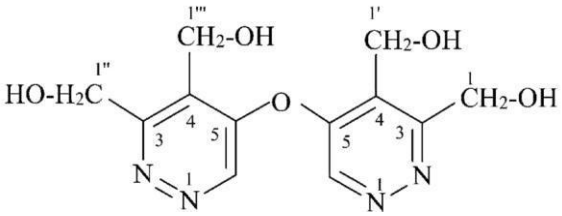


kwas [azanodiylolobis(metyleno)]bis(fosfonowy)

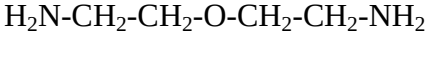


1,1′,1″,1‴-[oksydi(pirydazyno-4,3,5-triylo)]tetra(metanol) (PIN)
(zestaw lokantów ‘3,4,5’ jest niższy niż ‘4,5,6’i zestaw lokantów ‘3,5’jest najniższym zestawem lokantów pirydazyny przypisanych dla przyłączenia do zwielokrotnionej struktury macierzystej)

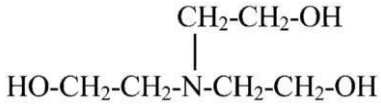
[**Uwaga:** użycie tu lokantu ‘1’ dla metanolu patrz P-14.3.3.1]



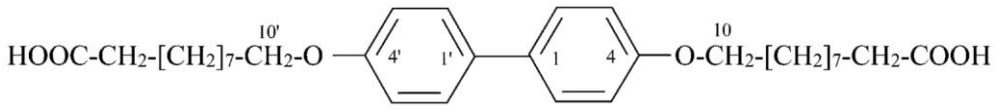
1,1′,1″,1‴-[oksydi(pirydazyno-5,3,4-triylo)]tetra(metanol) (PIN)
(zestaw lokantów ‘5,3,4’ jest niższy niż ‘4,5,6’i zestaw lokantów ‘3,4’ jest najniższym zestawem lokantów pirydazyny przypisanych dla przyłączenia do zwielokrotnionej struktury macierzystej)



2,2′-oksydi(etano-1-amina) (PIN)

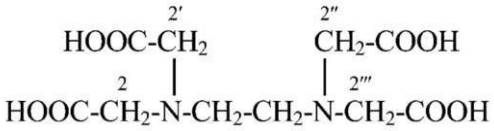


2,2′,2″-nitrylotri(etan-1-ol) (PIN)



kwas 10,10′-[[1,1′-bifenylo]-4,4′-diylobis(oksy)]di(dekanowy)

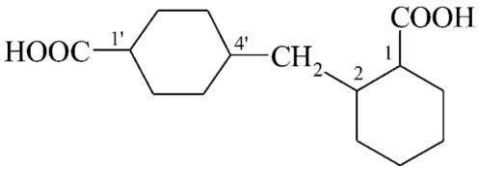
[**Uwaga:** W przytoczonej powyższej nazwie występuje podwójny zestaw kwadratowych nawiasów, ponieważ kwadratowe nawiasy są wymagane dla nazw podstawnikowych pochodzących od nazw zespołów pierścieni (patrz P-16.5.2.1) i kwadratowe nawiasy są potrzebne do zamknięcia multiplikacyjnej nazwy podstawnikowej]



kwas 2,2′,2″,2‴-(etano-1,2-diylodinitrylo)tetraoctowy
N,*N*′-etano-1,2-diylobis[*N*-(karboksymetylo)glicyna]

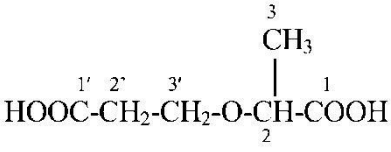
P-15.3.2.1.1 Jeśli jest możliwość wyboru większą liczbę primów nadaje się lokantom macierzystej struktury o wyższej numeracji miejsca przyłączenia do multiplikacyjnego podstawnika. Takie nazwy nie są akceptowane jako preferowane nazwy IUPAC, ale mogą być używane w ogólnej nomenklaturze; w tych przypadkach preferowane nazwy IUPAC tworzone są według zasad nomenklatury podstawnikowej (patrz P-51.3.3).

Przykłady:



kwas 2,4′-metylenodi(cykloheksano-1-karboksylowy) (nazwa multiplikacyjna)
kwas 2-[(4-karboksycykloheksylo)metylo]cykloheksano-1-karboksylowy (PIN; patrz P-45.1.2)

[nie kwas 4-[(2-karboksycykloheksylo)metylo]cykloheksano-1- karboksylowy; lokant podstawnika '2' jest niższy niż '4'' (patrz P-45.1.2)]



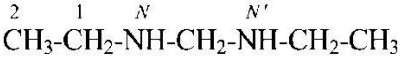
kwas 2,3′-oksydi(propanowy) (nazwa multiplikacyjna)
kwas 2-(2-karboksyetoksy)propanowy (PIN)

[nie kwas 3-(1-karboksyetoksy)propanowy; lokant podstawnika ‘2’ jest niższy niż ‘3’ (patrz P-45.1.2)]

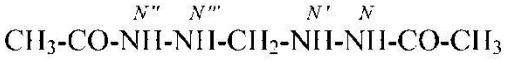
P-15.3.2.2 Lokanty dla atomów azotu w identycznych jednostkach strukturalnych

P-15.3.2.2.1 W nomenklaturze multiplikacyjnej stosowanie primów na pisanej kursywą literze *N* służy do rozróżnienia atomów azotu w identycznych jednostkach strukturalnych, które zawierają jedną charakterystyczną grupą z jednym lub więcej atomów azotu.

Przykłady:



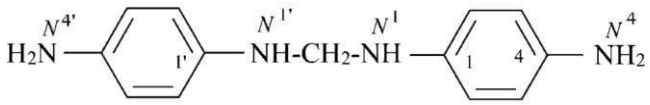
N,*N*′-metylenodi(etano-1-amina) (PIN)



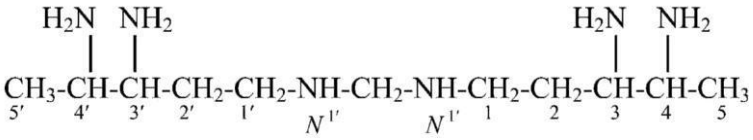
N′,*N*‴-metylenodiacetohydrazyd (PIN)

P-15.3.2.2.2 W nomenklaturze multiplikacyjnej arabska numeracja w indeksie górnym wskazuje lokant macierzystej struktury, do którego przyłączona jest grupa charakterystyczna. Dla rozróżnienia pomiędzy atomami azotu w identycznych jednostkach strukturalnych, zawierających dwie lub więcej grup charakterystycznych z jednym lub więcej atomami azotu, używa się odpowiednią liczbę primów, na przykład N^1, $N^{2'}$, $N^{4''}$, etc.

Przykłady:



N^1,$N^{1'}$-metylenodi(benzeno-1,4-diamina) (PIN)



N^1,$N^{1'}$-metylenodi(pentano-1,3,4-triamina) (PIN)

[**Uwaga:** lokant przyłączenia drugiej identycznej struktury macierzystej jest N^1; ten lokant jest primowany]

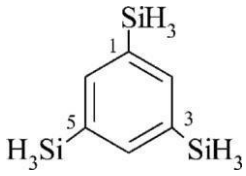
Dla struktur macierzystych z wieloma atomami azotu takich jak di- lub trikarboksyimidoamidy (patrz P-66.4.1.4) i cyklofanoaminy (patrz P-62.2.5.2) potrzebna jest jeszcze bardziej skomplikowana struktura lokantów taka jak primowane lokanty literowe z cyframi w indeksie górnym lub w indeksie górnym z cyframi w indeksie górnym.

P-15.3.2.3 Stosowanie przedrostków zwielokrotniających ‘bis’, ‘tris’, *etc.*

Identyczne struktury macierzyste dla których nie mogą być użyte przedrostki numeryczne ‘di’, ‘tri’, *etc.* z powodu możliwej niejednoznaczności (patrz P-16.3.6) zamykane są w nawiasach, w

zależności od potrzeby, okrągłych lub kwadratowych i poprzedzane numerycznymi wyrażeniami ‘bis’,’tris’, etc.

Przykłady



(benzeno-1,3,5-triylo)tris(silan) (PIN)
(nie benzeno-1,3,5-triylotrisilan;
trisilan oznacza $H_3Si\text{-}SiH_2\text{-}SiH_3$)

$H_3Si\text{-}[CH_2]_{14}\text{-}O\text{-}[CH_2]_{14}\text{-}SiH_3$
[oksydi(tetradekano-14,1-diylo)]bis(silan) (PIN)
‘di’ przed ‘tetradekano-14,1-diyl’ patrz P-16.3.4c]

P-15.3.2.4 Podstawione identyczne jednostki strukturalne (patrz P-15.3.1.1)

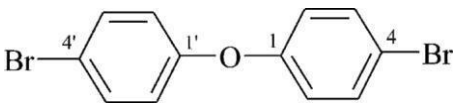
Kiedy identyczne struktury macierzyste połączone przez symetryczne grupy multiplikacyjne zawierają podstawniki inne niż główna grupa charakterystyczna wymienia się je jako przedrostki na dwa sposoby.

P-15.3.2.4.1 Podstawniki identycznych struktur macierzystych inne niż główna grupa charakterystyczna, gdy występują, wymieniane są jako przedrostki skojarzone z identyczną strukturą macierzystą jeśli spełniają dwa następujące warunki:

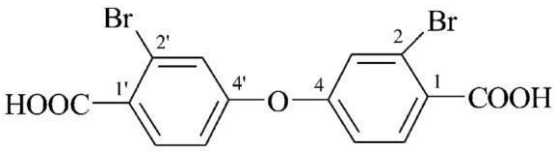
(1) łączące wiązania (pojedyncze albo wielokrotne) pomiędzy centralnym podstawnikiem grupy multiplikacyjnej i wszystkie następne jednostki strukturalne są identyczne;
(2) lokanty wszystkich podstawników identycznych struktur macierzystych, włączając przyrostki, są identyczne.

Identyczne struktury macierzyste razem z przedrostkami i przyrostkami, jeśli występują, traktuje się jako grupy zespolone lub kompleksowe, zamyka w nawiasach okrągłych, kwadratowych lub klamrowych zgodnie z porządkiem podanym w P-16.5 i określa przez odpowiedni numeryczny przedrostek ‘bis’, ‘tris’, *etc.*

Przykłady:

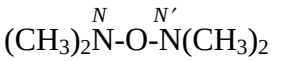


1,1′-oksybis(4-bromobenzen) (PIN)

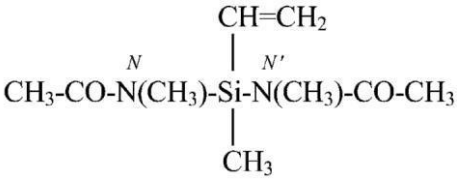


kwas 4,4′-oksybis(2-bromobenzoesowy) (PIN)

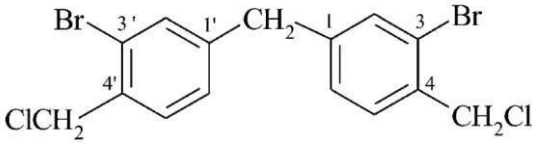
$F_3\overset{1}{S}i\text{-}SiF_2\text{-}CH_2\text{-}\overset{1'}{S}iF_2\text{-}SiF_3$ 1,1′-metylenobis(pentafluorodisilan) (PIN)



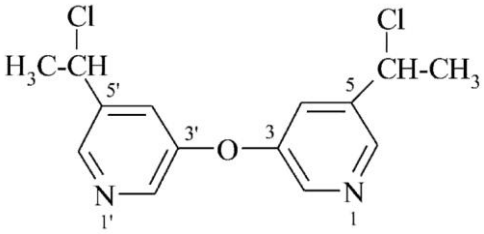
N,*N*′-oksybis(*N*-metylometanoamina) (PIN)
tetrametylodiazoksan (patrz P-21.2.3.1)



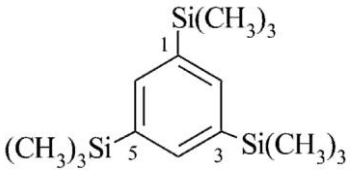
N,*N*′-[etenylo(metylo)silanodiylo]bis(*N*- metyloacetamid) (PIN)



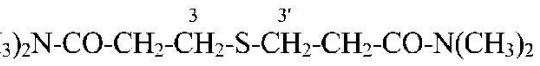
1,1′-metylenobis[3-bromo-4-(chlorometylo)benzen] (PIN)



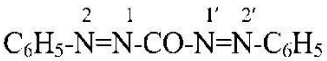
3,3′-oksybis[5-(1-chloroetylo)pirydyna] (PIN)



(benzeno-1,3,5-triylo)tris(trimetylosilan) (PIN)



3,3′-sulfanodiylobis(*N*,*N*-dimetylopropanoamid) (PIN)

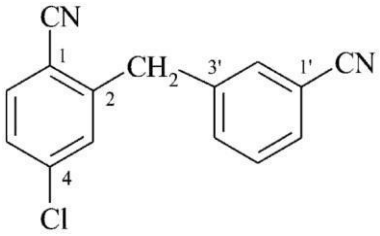


bis(fenylodiazenylo)metanon (PIN)
[nie 1,1’-karbonylobis(2-fenylodiazen)]

P-15.3.2.4.2 Kiedy warunki (1) i (2), zdefiniowane powyżej w P-15.3.2.4.1, nie są spełnione podstawniki inne niż określone przyrostkami, jeśli występują, wymienia się jako przedrostki przed

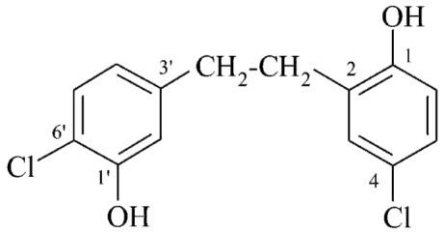
nazwą zespołu. Przedrostkom tym przypisuje się najniższe dostępne lokanty po zapewnieniu pierwszeństwa głównym grupom charakterystycznym i łączącym multiplikacyjnym podstawnikom. Takie nazwy nie są akceptowane jako preferowane nazwy IUPAC ale mogą być używane w ogólnej nomenklaturze. W tych przypadkach preferowane nazwy IUPAC są tworzone według zasad nomenklatury podstawnikowej. (patrz P-51.3.3).

Przykłady:



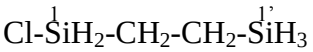
4-chloro-2,3′-metylenodibenzonitryl (nazwa multiplikacyjna; pokazano numerację)
4-chloro-2-[(3-cyjanofenylo)metylo]benzonitryl (PIN)

[nie 3-[(5-chloro-2-cyjanofenylo)metylo]benzonitryl; PIN ma większą liczbę podstawników; patrz P-45.2.1]



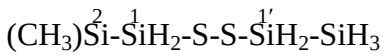
4,6′-dichloro-2,3′-(etano-1,2-diylo)difenol (nazwa multiplkatywna; pokazano numerację)
2-chloro-4-[2-(5-chloro-2-hydroksyfenylo)etylo]fenol (PIN)

[nie 4-chloro-2-[2-(4-chloro-3-hydroksyfenylo]fenol; zestaw lokantów dla podstawników w porządku ich występowania w PIN, 2′,4′, jest niższy niż '4,2';patrz P-45.2.2]



1-chloro-1,1′-(etano-1,2-diylo)bis(silan) (nazwa multiplikacyjna; pokazano numerację)
chloro(2-sililoetylo)silan (PIN)

[nie [(2-chlorosililo)etylo]silan; macierzysty silan PIN-u ma więcej podstawników (patrz P-45.1.1]

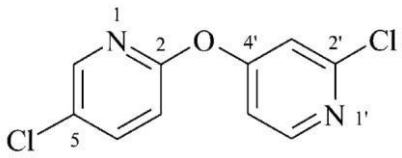


2-(disilanylodisulfanylo)-1,1,1-trimetylodisilan (PIN)

[nie [2-(2,2,2-trimetylodisilan-1-ylo)disulfanylo]disilane , macierzysty disilan PIN-u ma więcej podstawników; patrz P-45.1.1]

[nie 1,1-dimetylo-3,4-ditia-1,2,5,6-tetrasilaheptane; potrzebne są cztery hetero jednostki dla nazwy zamiennej szkieletu (patrz P-51.4)]

2,2,2-trimetylo-1,1′-(disulfanodiylo)bis(disilan) (nazwa multiplikacyjna; pokazano numerację)

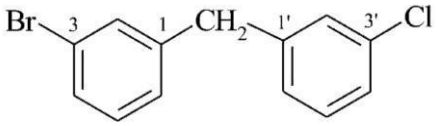


2′,5-dichloro-2,4′-oksydipirydyna (nazwa multiplikacyjna; pokazano numerację)
2-chloro-4-[(5-chloropirydyn-2-yl)oksypirydyna (PIN)

[nie 5-chloro-2-[(2-chloropirydyn-4-yl)oksy]pirydyna; zestaw lokantów dla podstawników ‘2,4’ w PIN jest niższy niż ‘2,5’; patrz P-45.2.2]

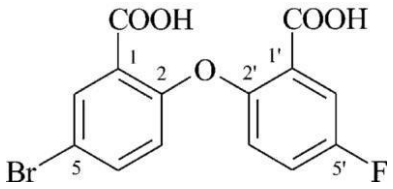
P-15.3.2.4.3 Kiedy istnieje możliwość wyboru, nieprimowane lokanty przypisuje się identycznej strukturze macierzystej, której podstawniki wymieniane są jako pierwsze w porządku alfanumerycznym.

Przykłady:



3-bromo-3′-chloro-1,1′-metylenodibenzen (nazwa multiplikacyjna; pokazano numerację)
1-bromo-3-[(3-chlorofenylo)metylo]benzen (PIN)

[nie 1-[(3-bromofenylo)metylo]-3-chlorobenzen; ‘bromochloro’ w porządku alfanumerycznym jest preferowane względem ‘bromofenylo’; patrz P-45.5]



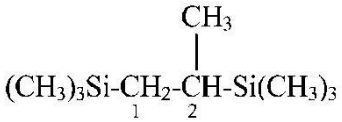
kwas 5-bromo-5′-fluoro-2,2′-oksydibenzoesowy (nazwa multiplikacyjna; pokazano numerację)
kwas 2-(4-bromo-2-karboksyfenoksy)-5-fluorobenzoesowy (PIN)

[nie kwas 5-bromo-2-(2-karboxy-4-fluorofenoksy)benzoesowy; w obu nazwach zestaw lokantów jest taki sam, ‘2,5’, ale kolejność występowania lokantów w PIN jest ‘2,5’ co jest niższe od ‘5,2’ (patrz P-45.2.3)]

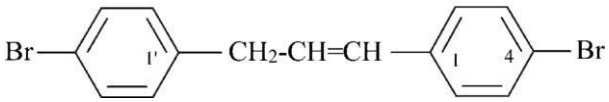
P-15.3.3 Identyczne jednostki połączone przez niesymetryczne grupy multiplikacyjne

P-15.3.3.1 Dopuszcza się niesymetryczne centralne podstawniki multiplikacyjne jeżeli są one utworzone z multiwalencyjnego podstawnika, z którym następne grupy łączą się przez identyczne wiązania (pojedyncze lub wielokrotne). Nie ma ograniczenia co do liczby indywidualnych grup w pełnym centralnym podstawniku użytym jako multiplikator.

Przykłady:



(propano-1,2-diylo)bis(trimetylosilan) (PIN)
trimetylo[1-(trimetylosililo)propan-2-ylo]silan

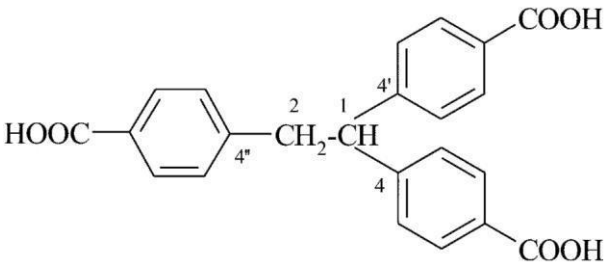


1,1′-(prop-1-eno-1,3-diylo)bis(4-bromobenzen) (PIN)
1-bromo-4-[3-(4-bromofenylo)prop-1-en-1-ylo]benzene
[nie 1-bromo-4-[3-(4-bromofenylo)prop-2-en-1-ylo]benzen; poprawna nazwa podstawnikowa ma niższe lokanty w macierzystym podstawniku]

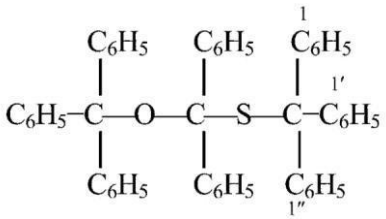
P-15.3.3.2 Wybór pomiędzy nazwami multiplikacyjnymi

P-15.3.2.2.1 Preferowana nazwa multiplikuje najwięcej identycznych macierzystych struktur.

Przykłady:



kwas 4,4′,4″-(etano-1,1,2-triylo)tribenzoesowy (PIN)
kwas 4,4′-[2-(4-karboksyfenylo)etano-1,1-diylo]dibenzoesowy preferowana nazwa IUPAC multiplikuje więcej identycznych struktur, ‘3’ *vs* ‘2’

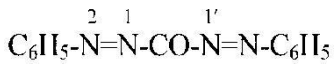


1,1′,1″-({[difenylo(trifenylometoksy)metylo]sulfanylo}metanotriylo)tribenzen (PIN)
[nie {(trifenylometoksy)[(trifenylometylo)sulfanylo]metanodiylo}dibenzen]
[nie ({difenylo[trifenylometylo)sulfanylo]metoksy}metanotriylo)tribenzen; preferowana nazwa IUPAC jest niższa alfanumerycznie; ‘difenylotrifenylometoksy’ jest niższe niż ‘difenylotrifenylometyl’]

P-15.3.3.2.2 Porządek starszeństwa klas (patrz P-41) stosuje się kiedy trzeba dokonać wyboru

pomiędzy macierzystą strukturą i składnikiem grupy multiplikacyjnej.

Przykład:



bis(fenylodiazenylo)metanon (PIN)
[nie 1,1′-karbonylobis(2-fenylodiazen);
nie 1,1′-[karbonylobis(diazenodiylo)]dibenzen;
keton jest starszy niż ‘diazen’ a ten jest starszy niż karbocykl ‘benzen’; patrz P-41]

P-15.3.4 Ograniczenia nomenklatury multiplikacyjnej

Kiedy multiplikacyjna nomenklatura nie jest możliwa, do tworzenia preferowanych nazw IUPAC używa się nomenklatury podstawnikowej. Multiplikacyjnej nomenklatury nie używa się w następujących sytuacjach.

P-15.3.4.1 Niedopuszczalne podstawniki multiplikacyjne
P-15.3.4.2 Niedopuszczalne identyczne jednostki

P-15.3.4.1 Niedopuszczalne podstawniki multiplikacyjne

Trzy różne typy multiplikacyjnych podstawników nie są dopuszczalna w nomenklaturze multiplikacyjnej.

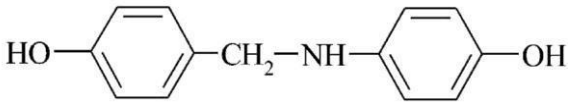
P-15.3.4.1.1 Niesymetryczne podstawniki zawierające dwa lub więcej różnych składników.

Przykłady:

(1) -CH_2-OO- jak w H_3Si-SiH_2-CH_2-OO-SiH_2-SiH_3

1-[(disilanylometylo)peroksy]disilan (PIN)
nie [(disilanyloperoksy)metylo]disilan; ‘disilanylometyloperoksy’ poprzedza w porządku alfanumerycznym ‘disilanyloperoksymetyl’(patrz P-14.5)]
[nie 3,4-dioksa-1,2,6,7-tetrasilaheptan; cztery hetero jednostki są potrzebne do utworzenia nazwy zamiennej szkieletu (patrz P-51.4)]

(2) -CH_2-NH- jak w



4-[(4-hydroksyanilino)metylo]fenol (PIN)
[nie 4-{[(4-hydroksyfenylo)metylo]amino}fenol;
‘hydroksyanilinometyl’ poprzedza ‘hydroksyaminofenylometyl’ ... (patrz P-14.5)]

(3) -O-CH_2-CH_2-S- jak w H_3Si-SiH_2-O-CH_2-CH_2-S-SiH_2-SiH_3

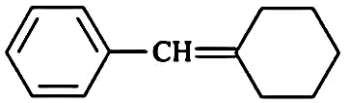
3-oksa-6-tia-1,2,7,8-tetrasilaoktan (PIN)
1-{[2-disilanyloksy)etylo]sulfanylo}disilan

[nie 1-[2-(disilanylosulfanylo)etoksy]disilan; ‘disilanyloksy’ w porządku alfanumerycznym poprzedza ‘disilanylosulfanyl’; patrz P-14.5]

P-15.3.4.1.2 Niesymetryczne podstawniki o końcowych atomach z różnego typu wolnymi walencyjnościami.

Przykłady:

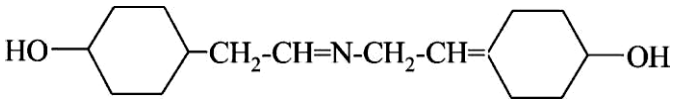
(1) –CH= jak w



(cykloheksylidenometylo)benzen (PIN)

[nie (fenylometylideno)cykloheksen; benzen jest starszy niż cykloheksan (patrz P-44.4.1.1)]

(2) -CH-CH=N-CH_2-CH- jak w

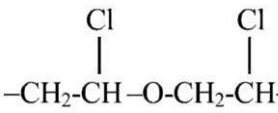


4-(2-{[2-(4-hydroksycykloheksylo)etylideno]amino}etylideno)cykloheksan-1-ol (PIN)

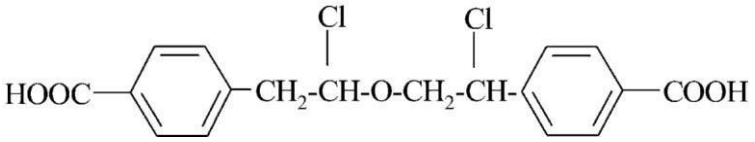
[nie 4-(2{[2-(4-hydroksycykloheksylideno)imino)etylo]imino}etylo)cykloheksan-1-ol; ‘(hydroksycykloheksylo)etyliden’ w porządku alfanumerycznym poprzedza ‘(hydroksycykloheksylideno)etyl’; patrz P-14.5].

P-15.3.4.1.3 Niesymetrycznie podstawione jednostki składników

Przykład:



jak w



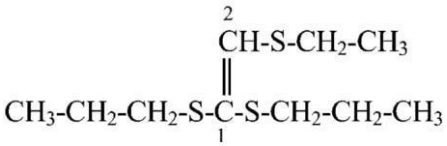
kwas 4-{2-[2-(4-karboksyfenylo)-1-chloroetoksy]-1-chloroetylo}benzoesowy (PIN)

[nie kwas 4-{2-[2[(4karboksyfenylo)-2-chloroetoksy]-2-chloroetylo)benzoesowy; ‘1-chloroetoksy’ w porządku alfanumerycznym poprzedza ‘2-chloroetoksy’ patrz P-45.5]

P-15.3.4.2 Niedopuszczalne identyczne jednostki

Acykliczne węglowodory, nasycone lub nienasycone nie mogą być użyte w nomenklaturze multiplikacyjnej jako struktury macierzyste. [patrz P-15.3.1.1(b)].

Przykład:



1-{[2-(etylosulfanylo)-1-(propylosulfanylo)eten-1-ylo]sulfanylo}propan (PIN, nazwa podstawnikowa)

(nie 1-{[2-(etylosulfanylo)eteno-1,1-diyl]bis(sulfanylo)}dipropan; alkeny ciągle nie mogą być uważane za identyczne jednostki)

P-15.4 NOMENKLATURA ZAMIENNA (‘a’) SZKIELETU

P-15.4.0 Wprowadzenie

Nomenklatura zamienna (‘a’) szkieletu jest typem nomenklatury zamiennej, która obejmuje również nomenklaturę zamienną funkcji (patrz P-13.2). Nomenklatura zamienna funkcji jest omówiona w P-15.5. Tak jak zamianę funkcji, zamianę szkieletu traktuje się jako metodę tworzenia nomenklatury.

W nomenklaturze związków organicznych, zamiana szkieletu polegająca na wymianie atomu węgla na inny atom mieści się w ogólnym zakresie nomenklatury związków organicznych i jest nazywana nomenklaturą zamienną (‘a’) szkieletu, ponieważ heteroatomy zamieniające atomy węgla wskazywane są za pomocą nierozłącznych przedrostków kończących się na ‘a’. Nomenklatura zamienna (‘a’) szkieletu obejmuje również zamianę atomów boru przez inne atomy, w tym atomy węgla (patrz P-68.1.1.3.1) i taką samą wymianę heteroatomów przez inne atomy, włączając atomy węgla, modyfikującą podstawową strukturę związku naturalnego jak opisano w P-101.4. Zamiana szkieletu wskazana innymi metodami niż przedrostek ‘a’ opisana jest dla zamiany atomów azotu w niektórych heterocyklach na atomy fosforu lub arsenu (patrz Tabela 2.8) i atomów tlenu na atomy siarki, selenu i telluru w innych określonych heterocyklach (patrz Tabela 2.7).

Podrozdział ten opisuje przede wszystkim zamianę szkieletu w wodorkach macierzystych. Nomenklaturę zamienną (‘a’) szkieletu używa się na dwa sposoby:

(a) do tworzenia nazw heterocyklicznych wodorków macierzystych przez zamianę atomów węgla w odpowiednich cyklicznych węglowodorach i
(b) do tworzenia nazw dla heterocyklicznych struktur prostszych niż nazwy utworzone przez postępowanie według zasad nomenklatury podstawnikowej, na przykład w nazywaniu poliamin, polieterów i td, przez zamianę atomów węgla w odpowiednich węglowodorach acyklicznych.

> W poprzednich zaleceniach, heterocykliczny łańcuch musiał być zakończony atomem węgla (reguła R-2.2.3.1 w Przewodniku z 1993 roku); według obecnych zaleceń łańcuch heterocykliczny może być zakończony przez każdy z następujących heteroatomów: P, As, Sb, Bi, Si, Ge, Sn, Pb, B, Al, Ga, In, Tl i C (patrz P-15.4.3.1)

Wybór preferowanej nazwy IUPAC dotyczącej nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu omówiony jest w P-51.4.

P-15.4.1 Ogólne reguły

P-15.4.1.1 Przedrostki nierozłączne nazywane przedrostkami ‘a’ stosowane są do określenia atomów zamieniających atomy szkieletu z ich standardową wiązalnością. Te, które odnoszą się do obecnych zaleceń są wymienione w Tabeli 1.5.

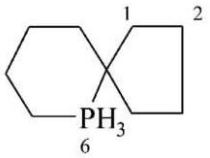
Tabela 1.5 Przedrostki zamiany (‘a’) szkieletu

Wiązalność standardowa	**3**		**4**		**3**		**2**		**1**	
	B	bora	C	karba	N	aza	O	oksa	F	fluora
	Al	alumina	Si	sila	P	fosfa	S	tia	Cl	chlora
	Ga	galla	Ge	germa	As	arsa	Se	selena	Br	broma
	In	inda	Sn	stanna	Sb	stiba	Te	tellura	I	joda
	Tl	talla	Pb	plumba	Bi	bizma	Po	polona	At	astata

P-15.4.1.2 Do nazywania i numerowania stosuje się tu następujący porządek malejącego starszeństwa pierwiastków: F > Cl > Br > I > At > O > S > Se > Te > Po > N > P > As > Sb > Bi > C > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al. > Ga > In > Tl (patrz Załącznik 1). Nazwana i ponumerowana struktura zmodyfikowana przez zamianę (‘a’) szkieletu jest traktowana jak nowy wodorek macierzysty. Ponieważ lokanty przypisane do heteroatomów mają istotne znaczenie, wszystkie lokanty musza być wymieniane tak jak to zdefiniowano w P-14.3.3.

P-15.4.1.3 Symbol λ^n używany jest do wskazania heteroatomu o niestandardowej wiązalności (P-14.1.3). Umieszczany jest w nazwach bezpośrednio za lokantem (bez oddzielającego łącznika) wskazującym heteroatom.

Przykład:



$6\lambda^5$-fosfaspiro[4.5]dekan (PIN)

P-15.4.1.4 Przedrostki anionowej i kationowej zamiany (‘a’) szkieletu używane do określenia anionowych i kationowych heteroatomów wyprowadzane są z obojętnych przedrostków podanych w Tabeli 1.5. Wszystkie te przedrostki zamiany szkieletu są wstępnie wybrane.

Przykłady:

fosfanida boranuida sulfanuida
λ^4-sulfanida

azanylia jodonia tionia

Wybór preferowanych nazw IUPAC wynikających z zamiany (‘a’) szkieletu został w pełni omówiony w P-73.4.

P-15.4.2 Nomenklaturę zamienną (‘a’) szkieletu do nazywania heterocyklicznych macierzystych wodorków stosuje się w trojaki sposób.

P-15.4.2.1 Nomenklaturę zamienną (‘a’) szkieletu stosuje się wprost do tworzenia pojedynczych heteromonocyklicznych macierzystych wodorków (patrz P-22.2.3), heterocyklicznych macierzystych wodorków von Baeyera (patrz P-23.3), heterocyklicznych macierzystych wodorków spiranowych złożonych wyłącznie z pierścieni monocyklicznych (patrz P-24.2.4.1) i fullerenów (patrz P-27.5). Wymienione związki heterocykliczne traktowane są jako identyczne struktury macierzyste w nomenklaturze multiplikacyjnej, ale nie jako składniki w nomenklaturze skondensowanej lub zespołów pierścieni.

P-15.4.2.2 Gdy pojedyncze heterocykle są składnikami heterocyklicznych pierścieniowych układów spiranowych nie wymienionych powyżej w P-15.4.2.1 [patrz P-24.3.4, P-24.4.3 (częściowo) i P-24.5.2 (częściowo)] albo heterocyklicznych układów fanowych (patrz P-26.5.2) lub heterocyklicznych zespołów pierścieni (patrz P-28.5), nomenklaturę zamienną (‘a’) szkieletu stosuje się w procedurze dwuetapowej. Najpierw struktura nazywana jest jako układ całkowicie lub częściowo węglowodorowy. Następnie dodaje się przedrostki zamiany (‘a’) szkieletu i wymienia je na początku nazwy. Nazwy utworzone tą metodą wykorzystuje się jako identyczne z macierzystymi strukturami w nomenklaturze multiplikacyjnej.

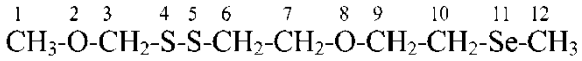
P-15.4.2.3 Nazwane nomenklaturą zamienną (‘a’) szkieletu heteromonocykliczne składniki ‘mancude’ modyfikuje się kiedy używane są jako komponenty pierścieni w nomenklaturze skondensowania [patrz P-25.2.2.1, P-25.2.2.4 (częściowo) i P-25.3.2.1.2]

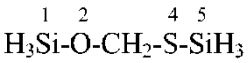
P-15.4.3 Nomenklatura zamienna (‘a’) dla acyklicznych wodorków macierzystych

P-15.4.3.1 Nazwy zamiany szkieletu tworzy się umieszczając przedrostki zamiany (‘a’) szkieletu na początku nazwy nierozgałęzionej struktury macierzystej zgodnie z porządkiem starszeństwa podanym w P-15.4.1.2. Przedrostki zwielokrotniające ‘di’, ‘tri’, 'tetra' itd wskazują wielokrotność takich samych heteroatomów, a lokanty określają ich pozycję. Łańcuch musi być zakończony atomem C lub jednym z następujących heteroatomów: P, As, Sb, Bi, Si, Ge, Sn, Pb, B, Al., Ga, In, Tl.

Zakończenie hetero łańcucha przez P, As, Sb, Bi, Si, Ge, Sn, Pb, B, Al., Ga, In, Tl jest odejściem od wcześniejszych zaleceń, wg których łańcuch mógł być zakończony tylko atomami węgla

Przykłady:





2,8-dioksa-4,5-ditia-11-selenadodekan (PIN)

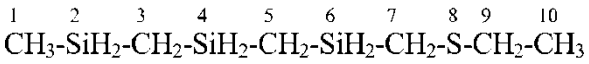
2-oksa-4-tia-1,5-disilapentan (PIN)

P-15.4.3.2 Numerowanie heteroacyklicznych macierzystych wodorków

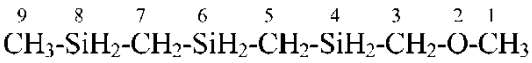
P-15.4.3.2.1 Nierozgałęzione łańcuchy numerowane są w sposób ciągły od jednego końca do drugiego tak aby heteroatomy traktowane jako zbiór bez uwzględniania ich rodzaju otrzymywały niższy zestaw lokantów. Jeśli istnieje możliwość wyboru wymienia się najpierw heteroatomy wg porządku starszeństwa podanego w P-15.4.1.2.

W obecnych zaleceniach nomenklatura zamienna (‘a’) szkieletu daje nowe acykliczne wodorki macierzyste, o numeracji ustalonej w sposób identyczny jak dla pierścieni i układów pierścieni; jest to zasadnicza modyfikacja Reguły C-0.6 (ref. 1). Przyrostki, końcówki i przedrostki są następnie dodawane zgodnie z już ustaloną numeracją.

Przykłady:



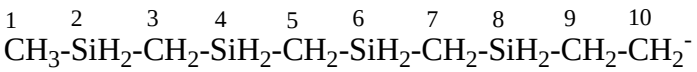
8-tia-2,4,6- trisiladekan (PIN)
(zbiór lokantów ‘2,4,6,8’ jest niższy niż ‘3,5,7,9’; patrz P-14.3.5)



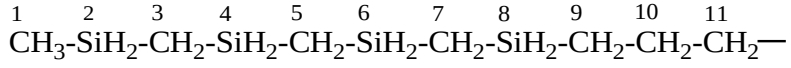
2-oksa-4,6,8-trisilanonan (PIN)
(zbiory lokantów heteroatomów ‘2,4,6,8’są identyczne i dlatego niski lokant jest przypisany atomowi ‘O’ a nie ‘Si’; patrz Uzupełnienie 1)

P-15.4.3.2.2 Wolne walencyjności podstawników otrzymują lokanty zgodne z ustaloną numeracją heterołańcucha.

Przykłady:



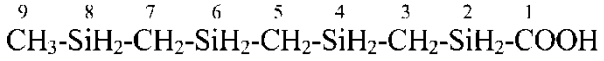
2,4,6,8-tetrasiladekan-10-yl (preferowany przedrostek)
[Uwaga: używa się ‘dekan-10-yl’ a nie ‘dec-10-yl’; patrz P-29.3.2.2]
2,4,6,8-tetrasiladekan-5-yl (preferowany przedrostek)



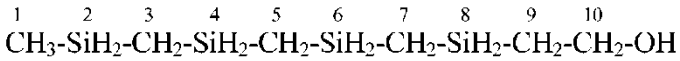
2,4,6,8-tetrasilaundekan-11-yl (preferowany przedrostek)

P-15.4.3.2.3 Grupy charakterystyczne wymieniane jako przyrostki otrzymują lokanty zgodne z ustaloną numeracją heterołańcucha.

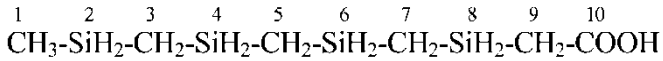
Przykłady:



kwas 2,4,6,8-tetrasilanonan-1-owy (PIN)
(lokant 1 nie jest pomijany zgodnie P-15.4.1.4)



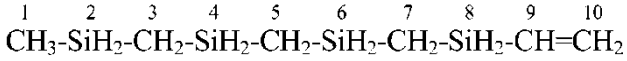
2,4,6,8-tetrasiladekan-1-ol (PIN)



kwas 2,4,6,8-tetrasiladekan-10-owy (PIN)

P-15.4.3.2.4 Wiązania podwójne i potrójne otrzymują lokanty zgodne z ustaloną numeracją hetero łańcucha, a jeśli jest możliwość wyboru, według ogólnego pierwszeństwa dla wiązań wielokrotnych. (patrz P-31.1.2).

Przykład:

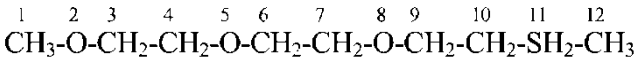


2,4,6,8-tetrasiladec-9-en (PIN)

P.15.4.3.2.5 Heteroatomy o niestandardowej wiązalności

(a) Niestandardowa wiązalność obojętnego heteroatomu szkieletowego w macierzystym wodorku wskazuje, za odpowiednim lokantem, symbol λ^n, w którym ‘n’ oznacza wiązalność (patrz P-14.1.3).

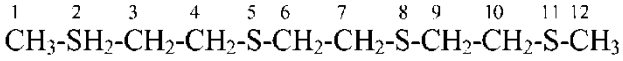
Przykład:



2,5,8-trioksa-11λ^4tiadodekan (PIN)
(‘O’ jest przed ‘S’ przy wyborze niższego lokantu, patrz Uzupełnienie 1)

(b) Tam gdzie istnieje możliwość wyboru, niższe lokanty przypisuje się heteroatomom o wyższej wiązalności.

Przykład:



$2\lambda^4$,5,8,11-tetratiadodekan (PIN)

P-15.4.3.3 Stosowanie przedrostków anionowych i kationowych zamiany (‘a’) szkieletu jest wyczerpująco omówione, odpowiednio, w P-72.4 i P-73.4.

P-15.5 NOMENKLATURA ZAMIENNA FUNKCJI

P-15.5.1 Definicja
P-15.5.2 Ogólna metodologia
P-15.5.3 Zakres nomenklatury zamiennej funkcji

P-15.5.1 Definicja

Nomenklatura zamienna funkcji jest metodą, w której atomy tlenu w grupach charakterystycznych i w związkach o macierzystych funkcjach zamienia się na atomy halogenu, chalkogenu i/albo azotu.

P-15.5.2 Ogólna metodologia

Zamianę atomu tlenu albo grupy hydroksylowej na inne atomy albo grupy można zapisać za pomocą nierozłącznych przedrostków i wrostków, odpowiednio, dołączonych i włączonych do nazw grup charakterystycznych, macierzystych wodorków i związków o macierzystych funkcjach mających zachowane lub systematyczne nazwy. Listę przedrostków i wrostków podaje Tabela 1.6. Przedrostki i wrostki stosuje się do określenia atomu(ów) zamieniającego –OO-, -S-, -Se-, -Te-, itd. Na przykład, ‘tio’ wskazuje zamianę atomów tlenu na atomy siarki w przedrostkach sulfonotioil i karbotioil i w związku o macierzystej funkcji kwasie tiooctowym. Podobnie, ‘perokso’ lub ‘peroksy’ wskazuje zamianę atomu tlenu przez grupę -OO- w przedrostku (kwas) peroksowy i w nazwie kwas peroksyoctowy. W przypadkach, w których występują dwa lub więcej przedrostków lub wrostków wskazujących na obecność dwóch lub więcej różnych zamieniających grup, są one wymieniane w kolejności alfabetycznej, na przykład, *Se*-kwas cykloheksanokarboselenotiowy (patrz P-65.1.5.1) i chlorek 1-amido-2-imidofosfonowy (patrz P-67.2.3).

P-15.5.3 Zakres nomenklatury zamiennej funkcji

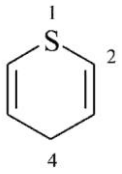
Przedrostki i wrostki podane w Tabeli 1.6 są stosowane zgodnie z określonymi regułami opisującymi zamianę w:

P-15.5.3.1 Zamiana w heterocyklicznych wodorkach macierzystych
P-15.5.3.2 Zamiana w grupach charakterystycznych wyrażonych za pomocą przyrostków w nomenklaturze podstawnikowej
P-15.5.3.3 Zamiana w grupach charakterystycznych wyrażonych za pomocą przedrostków w nomenklaturze podstawnikowej
P-15.5.3.4 Zamiana w związkach o macierzystych funkcjach

P-15.3.1 Zamiana w heterocyklicznych wodorkach macierzystych

Przedrostki używane są do modyfikowania ograniczonej grupy macierzystych wodorków w następujący sposób. Patrz Tabela 2.2 dla piranu, Tabela 2.3 dla morfoliny, Tabela 2.8 dla chromenu, izochromenu i ksantenu oraz Tabela 3.1 dla chromanu i izochromanu.

Przykład:



4*H*-tiopiran (PIN)
4*H*-tiin

P-15.5.3.2 Zamiana w grupach charakterystycznych wyrażonych za pomocą przyrostków w nomenklaturze podstawnikowej

Zamiana w przyrostkach jest ograniczona do –OO-, =S, -S-, =Se, -Se-, =Te, -Te-, =NH i $=NNH_2$ oraz dowolnej kombinacji tych afiksów (patrz Tabela 1.6). Przyrostki włączające atom węgla i odpowiadające kwasom sulfonowym i sulfinowym oraz ich analogom modyfikowane są wrostkami. Inne przyrostki modyfikowane są przedrostkami. Przykłady i porządek starszeństwa przyrostków modyfikowanych zamianą funkcji pokazują, odpowiednio, Tabele 4.2 i 4.3 (Rozdział P-4).

Tabela 1.6 Przedrostki i wrostki w nomenklaturze zamiennej funkcji

Przedrostek	**Wrostek**	**Zamieniony atom lub grupa**	**Zamieniający atom lub grupa**
amido	amido	-OH	$-NH_2$
azydo	azydo	-OH	$-N_3$
bromo	bromido	-OH	-Br
chloro	chlorydo	-OH	-Cl
cyjaniano	cyjaniatydo	-OH	-OCN
cyjano	cyjanido	-OH	-CN
ditioperoksy	ditioperokso	-O-	-S-S-
fluoro	fluorydo	-OH	-F
hydrazydo	hydrazydo	-OH	$-NH-NH_2$
hydrazono	hydrazono	=O	$=N-NH_2$
imido	imido	=O	=NH
jodo	jodydo	-OH	-I
izocyjaniano	izocyjaniatydo	-OH	-NCO

izocyjano	izocyjanido	-OH	-NC
izotiocyjaniano*	izotiocyjaniatydo*	-OH	_-NCS
nitrydo	nitrydo	=O i -OH	N
peroksy	perokso	-O-	-O-O-
seleno	seleno	=O albo -OH	=Se albo -SeH
telluro	telluro	=O albo -OH	=Te albo -TeH
tio	tio	=O albo -OH	=S albo -S-
tiocyjaniano*	tiocyjaniatydo*	-OH	-SCN
tioperoksy*	tioperokso*	-O-	-OS- albo –SO-

*Analogi selenowe i tellurowe nazywa się używając ‘seleno’ i ‘telluro’ w miejsce ‘tio’

Przykłady:

-CS-OH O-kwas…karbotiowy (preferowany przyrostek)

-C(=NH)-OH kwas…...karboksyimidowy (preferowany przyrostek)

-SO-OOH kwas…...sulfinoperoksowy (preferowany przyrostek)

-S(-NNH_2)-OH kwas…...sulfinohydrazonowy (preferowany przyrostek)

-(O)O-SH kwas…..tiowy (preferowany przyrostek)

-(C)S-NH_2 tioamid (preferowany przyrostek; bez kontrakcji do tiamid)

=S tion (wstępnie wybrany przyrostek)

-SeH selenol (wstępnie wybrany przyrostek)

P-15.5.3.3 Zamiana w grupach charakterystycznych wyrażona za pomocą przedrostków w nomenklaturze podstawnikowej

Zamiana funkcji jest stosowana do modyfikowania przedrostków zawierających atomy węgla przez dodanie przedrostków ‘tio’, ‘seleno’ i ‘telluro’. Przedrostki te opisane są w odpowiedniej sekcji P-6 i wymienione w Załączniku 2.

Przykłady:

C{O/S}H tiokarboksy (preferowany przerostek)

=S tiokso
sulfanyliden (wstępnie wybrany przedrostek)

P-15.5.3.4 Zamiana w związkach o macierzystych funkcjach

Do modyfikowania kwasów karboksylowych i oksokwasów stosuje się zamianę funkcji za pomocą przedrostków i przyrostków według określonych reguł podanych dalej w P-15.5.3.4.1 i P-15.5.3.4.2. Zamiana funkcji jest również używana do modyfikowania zachowanych nazw wodorków o macierzystych funkcjach: mocznik i semikarbazon jak opisano w P-15.5.3.4.3. Zamiana funkcji nie jest stosowana przy zamianie atomu tlenu w ketonach, alkoholach lub ich pochodnych takich jak acetale, ketale i td. W ich przypadku zalecane jest używanie nazw systematycznych

Przykłady:

CH_3-CS-CH_3 propano-2-tion (PIN) (nie tioaceton)

C_6H_5-SH benzenotiol (PIN) (nie tiofenol)

P-15.5.3.4.1 W ogólnej nomenklaturze zachowane nazwy kwasów monokarboksylowych mogą być modyfikowane przedrostkami peroksy, tio, seleno i telluro do wskazania zamiany atomu tlenu przez zamieniający atom(y) -OO-, -S- lub =S, -Se- lub =Se i -Te- lub =Te (patrz P-65.1.4.1 i P-65.1.5.2).

Przykłady:

CH_3-CO-SH	CH_3-CH_2-CS-OH
S-kwas tiooctowy	*O*-kwas tiopropionowy
S-kwas etanotiowy (PIN)	*O*-kwas propanotiowy (PIN)

C_6H_5-CS-SH
kwas ditiobenzoesowy
kwas benzenokarboditiowy (PIN)

P-15.5.3.4.2 Nazwy mononuklearnych i polinuklearnych oksokwasów są modyfikowane przedrostkami i wrostkami, wymienionymi w Tabeli 1.6, według reguł opisanych w P-67.

Przykład:

CH_3-P(=NH)(OH)(SH)

kwas *P*-metylofosfonoimidotiowy (PIN)

P-15.5.3.4.3 Zachowane nazwy acyklicznych poliazotowych związków o macierzystych funkcjach opisane w P-65.1.6 i P-68.3.1 są modyfikowane przedrostkami ‘tio’, ‘‘seleno’ i ‘telluro’.

Przykłady:

H_2N-CS-NH_2	H_2N-NH-CSe-NH_2
tiomocznik (PIN; P-66.1.6.3)	selenosemikarbazyd
diamid karbonotiowy	hydrazynokarboselenoamid (PIN, patrz P-68.3.1.2.4)

P-15.6 NOMENKLATURA ŁĄCZONA

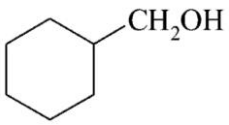
P-15.6.0 Wprowadzenie

Nomenklatura łączona w swej istocie opiera się na operacji łączenia, w której związek jest formalnie tworzony przez oderwania tej samej liczby atomów wodoru z każdego składnika w każdym miejscu ich połączenia. Tradycyjnie jest ona przeznaczona do nazywania związków mających grupę główną połączoną ze składnikiem łańcuchowym, który jest także bezpośrednio połączony wiązaniem węgiel-węgiel ze składnikiem cyklicznym. Metoda ta może być używana w ogólnej nomenklaturze jako alternatywa nomenklatury podstawnikowej, ale nie jest zalecana do tworzenia preferowanych nazw IUPAC (patrz P-51.5). Nazwy zostały zmodyfikowane (ref.2) tak, że pozycje lokantów w nazwach łączonych są zgodne z pozycjami lokantów w nazwach ustalonych w obecnych zaleceniach (patrz P-14.3.2). Inne aspekty, w tym ograniczenia, nomenklatury łączonej używanej w indeksach CAS są tu krótko omówione (P-15.6.2).

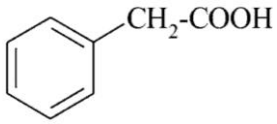
P-15.6.1 Tworzenie nazwy

P-15.6.1.1 Nazwy tworzone są przez zestawienie nazw składników. Najpierw wymieniana jest nazwa cyklicznego składnika, a za nią nazwa systematyczna lub zachowana składnika przyłączonego do głównej grupy charakterystycznej.

Przykłady:



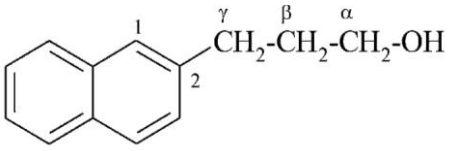
cykloheksanometanol
cykloheksylometanol (PIN)



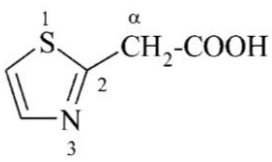
kwas benzenooctowy
kwas fenylooctowy (PIN)

P-15.6.1.2 Tam gdzie jest to konieczne, pozycję przyłączenia bocznego łańcucha do cyklicznego składnika wskazuje się odpowiednim lokantem umieszczanym przed nazwą składnika cyklicznego. Jeżeli występują już lokanty odnoszące się do elementów strukturalnych składnika cyklicznego, takich jak heteroatomy i wskazany atom wodoru, lokant przyłączenia wynika z nazwy składnika cyklicznego. Ponieważ acykliczny składnik musi kończyć się na cyklicznym składniku nie ma potrzeby podawania lokantu jego przyłączenia. Atomy węgla bocznego łańcucha wskazuje się greckimi literami zaczynając od głównej grupy charakterystycznej a kończąc na składniku cyklicznym; lokanty te są używane w nazwie tylko dla umiejscowienia innych podstawników bocznego łańcucha. Przy umieszczaniu greckich liter atom węgla grupy charakterystycznej (w kwasach, aldehydach, nitrylach itd) jest pomijany.

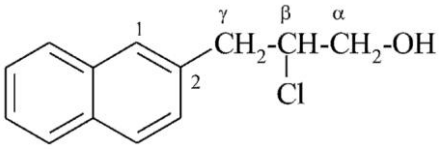
Przykłady:



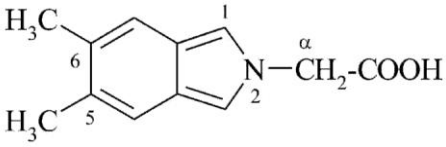
naftaleno-2-propanol
3-(naftalen-2-ylo)propan-1-ol (PIN)
3-(2-naftylo)propan-1-ol



kwas 1,3-tiazolo-2-octowy
kwas (1,3-tiazol-2-ilo)octowy (PIN)



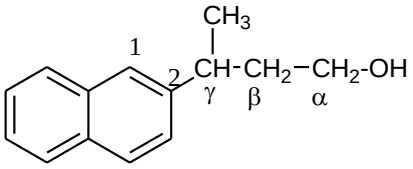
β-chloronaftaleno-2-propanol
2-chloro-3-(naftalen-2-ylo)propan-1-ol (PIN)



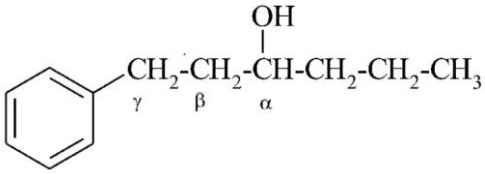
kwas 5,6-dimetylo-2*H*-izoindolo-2-octowy
kwas (5,6-dimetylo-2H-izoindol-2-ilo)octowy (PIN)

P-15.6.1.3 W nomenklaturze łączonej przyjmuje się zawsze, że łańcuch boczny rozciąga się tylko od grupy głównej do cyklicznego składnika. Wszystkie inne człony łańcuchowe, nawet rozciągające się do zakończenia łańcucha, są nazywane jako podstawniki; odpowiednie przedrostki i lokanty umieszcza się przed nazwą składnika cyklicznego.

Przykłady:



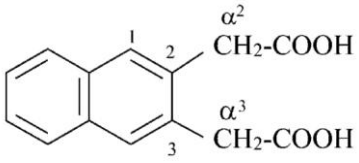
γ-metylonaftaleno-2-propanol
3-(naftalen-2-ylo)butan-1-ol (PIN)
3-(2-naftylo)butan-1-ol



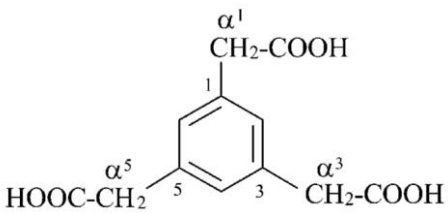
α-propylobenzenopropanol
1-fenyloheksan-3-ol (PIN)

P-15.6.1.4 Kiedy cykliczny składnik zawiera co najmniej dwa identyczne boczne łańcuchy, dla wskazania ich liczby używa się przedrostki zwielokrotniające ‘di’, ‘tri’, itd; przedrostki te umieszcza się przed nazwą bocznego łańcucha a cyfrowe indeksy górne stosuje do wszystkich lokantów bocznego łańcucha zamiast primowania.

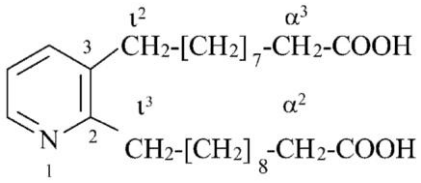
Przykłady:



kwas naftaleno-2,3-dioctowy
kwas 2,2′-(naftaleno-2,3-diylo)dioctowy (PIN)



kwas benzeno-1,3,5-trioctowy
2,2′,2″-(benzeno-1,3,5-triylo)trioctowy (PIN)

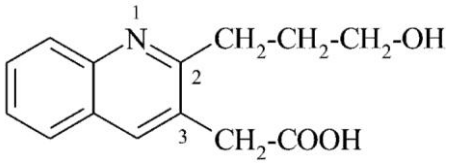


pirydyno-2,3-di(kwas dekanowy)
10,10′-(pirydyno-2,3-diylo)di(kwas dekanowy) (PIN)

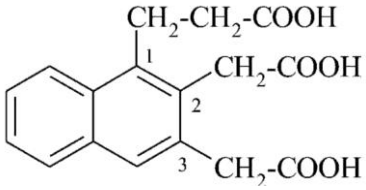
P-15.6.1.5 Przyłączenie różnych bocznych łańcuchów do cyklicznego składnika

(a) do nazywania metodą łączenia wybiera się łańcuch zawierający grupę charakterystyczną; lub
(b) jeżeli jest więcej niż jeden łańcuch zawierający główną grupę charakterystyczną, wybiera się nazwę łączoną wyrażającą większą liczbę głównych grup charakterystycznych. Gdy jest to konieczne, boczny łańcuch wybiera się przez zastosowanie porządku starszeństwa do wyboru łańcucha głównego. (patrz P-44.3).

Przykłady:



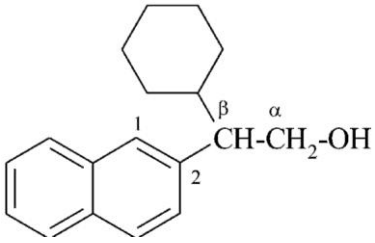
kwas 2-(3-hydroksypropylo)chinolino-3-octowy
kwas [2-(3-hydroksypropylo)chinolin-3-ylo]octowy (PIN)
(kwas karboksylowy jest starszy niż alkohol)



kwas 1-(2-karboksyetylo)naftaleno-2,3-dioctowy
kwas 3-[2,3-bis(karboksymetylo)naftalen-1-ylo]propanowy (PIN)

P-15.6.1.6 Kiedy łańcuch boczny jest połączony z dwoma różnymi cyklicznymi składnikami starszy pierścień lub układ pierścieni wybiera się zgodnie z porządkiem starszeństwa pierścieni i układów pierścieni (patrz P-44.2).

Przykład:



β-cykloheksylonaftaleno-2-etanol
(naftalen jest starszy niż cykloheksan)
2-cykloheksylo-2-(naftalen-2-ylo)etan-1-ol (PIN)

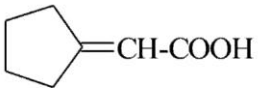
P-15.6.2 Ograniczenia nomenklatury łączonej

Nomenklatura łączona nie jest używana w przypadkach gdy:

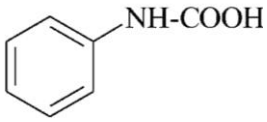
(a) podwójne wiązanie łączy acykliczny składnik z układem pierścieni;
(b) podwójne wiązanie lub heteroatom występuje w bocznym łańcuchu;
(c) dwie identyczne grupy charakterystyczne ulokowane są na bocznym łańcuchu pod warunkiem, że nie jest naruszony warunek maksymalnej liczby głównych grup charakterystycznych;
(d) grupy charakterystyczne o wyższym pierwszeństwie wymieniania jako grupa główna są bezpośrednio przyłączone do cyklicznego składnika ;
(e) dwie lub więcej charakterystycznych grup tego samego rodzaju ulokowane są na pierścieniu albo układzie pierścieni jako grupa główna.

W wymienionych powyżej przypadkach musi być stosowana zwykła nomenklatura podstawnikowa.

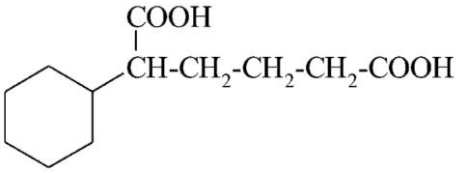
Przykłady:



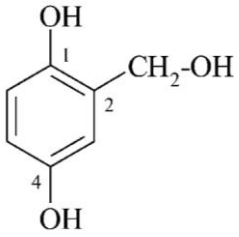
kwas cyklopentylidenooctowy (PIN)



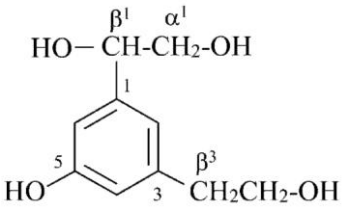
kwas fenylokarbamowy (PIN)



kwas 2-cykloheksyloheksanodiowy (PIN)



2-(hydroksymetylo)benzeno-1,4-diol (PIN)

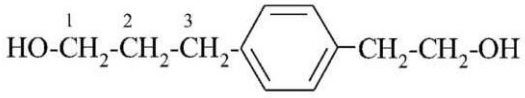


β,5-dihydroksybenzeno-1,3-dietanol
[5-hydroksy-3-(2-hydroksyetylo)fenylo]etano-1,2-diol (PIN)

P-15.6.3 Analiza tworzenia nazwy łączonej

Uwaga**:** PIN jest nazwą podstawnikową

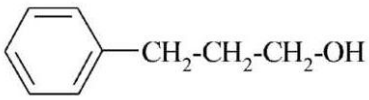
Przykład 1:



Analiza:

Grupa główna	OH	ol
Macierzysty:		
pierścień	C_6H_6	benzen
łańcuch	CH_3-CH_2-CH_3	propan

Łączona macierz obejmująca przyrostek:

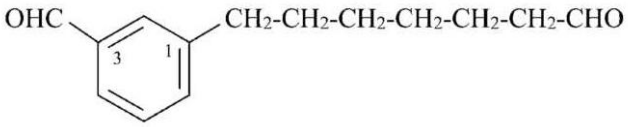


benzenopropanol

Przedrostek:	-CH_2-CH_2-OH	
Składniki przedrostka:	-OH	hydroksy
	-CH_2-CH_3	etyl
Nazwa przedrostka:		2-hydroksyetyl

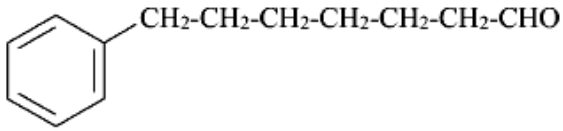
Razem z innymi regułami analiza ta prowadzi do nazwy łączonej:
4-(2-hydroksyetylo)benzenopropanol
3-[4-(2-hydroksyetylo)fenylo]propan-1-ol (PIN)

Przykład 2:



Grupa główna	-CHO	karboaldehyd albo al
Macierzysty:	pierścień	benzen
	łańcuch	heptan

Łączona macierz obejmująca przyrostek:



benzenoheptanal

Przedrostek	-CHO	formyl

Razem z innymi regułami analiza ta prowadzi do nazwy łączonej:

3-formylobenzenoheptanol
3-(7-oksoheptylo)benzaldehyd (PIN)

P-16 PISOWNIA NAZWY

P-16.0 Wprowadzenie
P-16.1 Pisownia
P-16.2 Znaki przestankowe
P-16.3 Przedrostki zwielokrotniające ‘di’, ‘tri’, itd. *vs*.

‘bis’, ‘tris’, itd
P-16.4 Inne wyrażenia liczbowe
P-16.5 Nawiasy
P-16.6 Kursywa
P-16.7 Usuwanie samogłosek
P-16.8 Dodawanie samogłosek
P-16.9 Primowanie

P-16.0 WPROWADZENIE

Aby uniknąć dwuznaczności i ustalić jasną zależność pomiędzy nazwą i odpowiadającą jej strukturą, nazwy pisane są zgodnie z symboliką określonej nomenklatury związków organicznych. Zalecany symbolizm jest szczególnie ważny przy tworzeniu preferowanej nazwy IUPAC. Jak zwykle, IUPAC uznaje potrzeby innych języków do wprowadzania specyficznych dla nich modyfikacji. Jednak, wszędzie tam gdzie to możliwe, należy stosować podane tu konwencje do tworzenia ogólnych nazw IUPAC i preferowanych nazw IUPAC.

W zaleceniach z 1979 i 1993 roku nazwy były pisane z dużej litery. W niedawnych publikacjach zasada ta zostało zarzucona aby potwierdzić, że nazwy związków organicznych nie są rzeczownikami właściwymi; powszechna zasada pisania z dużej litery na początku zdania musi być przestrzegana.

P-16.1 PISOWNIA

Pisownia nazw pierwiastków w języku angielskim podana jest w *Nomenclature of Inorganic Chemistry* IUPAC (ref. 12, Table 1, pp. 248-249), na przykład sulfur nie sulphur, aluminium nie aluminum i caesium nie cesium. 1

P-16.2 ZNAKI PRZESTANKOWE

P-16.2.1 Przecinki
P-16.2.2 Kropki
P-16.2.3 Dwukropki i średniki
P-16.2.4 Łączniki
P-16.2.5 Odstępy

P-16.2.1 Przecinki używane są:

(a) do oddzielania lokantów, liczebników lub italików

Przykłady: 1,2-dibromoetan (PIN, P-61.3.1)
N,*N*-dietylofurano-2-karboksyamid (PIN, P-66.1.1.3.1.1)

(b) do oddzielania liczb jak również liter pisanych kursywą w deskryptorach skondensowania, gdy wskazują one obecność odrębnego przyłączonego składnika; jednakże italiki odnoszące się do połączenia *peri*-skondensowanego nie są oddzielane przecinkami.

Przykłady: dibenzo[*c*,*g*]antracen [PIN, P-25.3.4.2.1 (c)]

6*H*-pirolo[3,2,1-*de*]akrydyna (PIN, P-25.3.1.3)

P-16.2.2 Kropki

Kropki używane są do oddzielania liczb określających długość mostka w nazwach polialicyklicznych utworzonych według systemu von Baeyera (patrz P-23.2.5.1) i długości łańcucha pomiędzy spiro atomami w nazwach spiranowych von Baeyera (patrz P-24.2.1)

Przykłady: bicyklo[3.2.1]oktan (PIN, P-23.2.3)
6-oksaspiro[4.5]dekan (PIN, P-24.2.4.1.1)

P-16.2.3 Dwukropki i średniki

Dwukropki oddzielają zbiory pokrewnych lokantów; jeżeli jest potrzebny wyższy poziom oddzielenia stosuje się średniki.

Przykłady: benzo[1″,2″:3,4;4″,5″:3′,4′]dicyklobuta[1,2-*b*:1′,2′-*c*′]difuran (PIN, patrz P-25.3.7.3)

1^1,2^1:2^2,3^1-tercyklopropan (PIN, patrz P-28.3.1)

P-16.2.4 Łączniki

P-16.2.4.1 Łączniki używane są w nazwach podstawnikowych:

(a) do oddzielania lokantów od słów lub części słów;
Przykład: 2-chloro-2-metylopropan (PIN, patrz P-61.3.1)

(b) po nawiasach, jeżeli za zamykającym nawiasem występuje lokant;
Przykład: 1-(chlorometylo)-4-nitrobenzen (PIN, patrz P-61.5.5.1)
N^1-(2-aminoetylo)-N^1,N^2,N^2-trimetyloetano-1,2-diamina (PIN, patrz P-62.2.4.1.3)

(c) do oddzielania lokantów sąsiadujących z otwierającym znakiem nawiasu;
Przykłady: 1-(3,4-dihydrochinolin-1(2*H*)-ylo)etan-2-on (PIN, patrz P-64.3.2)
N-acetylo-*N*-(3-chloropropanoilo)benzamid (PIN, patrz P-66.1.2.1)

(d) Do oddzielania liter rzymskich od liter pisanych kursywą;
Przykłady: di-*tert*-butyl (patrz P-61.2.3)
as-indacen (patrz P-25.1.1)

P-16.2.4.2 Nie umieszcza się łącznika przed liczbowym przedrostkiem wymienianym przed ujętym w nawiasy podstawnikiem związku, nawet wtedy gdy podstawnik zaczyna się od lokantu;

Przykład: *N*,1-bis(4-chlorofenylo)metanoimina (PIN, patrz P-62.3.1.1)

P-16.2.4.3 Łączniki oddzielają dwie części deskryptora skondensowania, to znaczy cyfry od liter pisanych kursywą;

Przykład: nafto[1,2-*a*]azulen (PIN, patrz P-25.3.1.3)

P-16.2.4.4 Łączniki oddzielają stereodeskryptory od pozostałej nazwy albo od części nazwy, do której się odnoszą;

Przykład: (2*E*)-but-2-en (PIN, patrz P-93.4.2.1.1)

P-16.2.4. 5 Długi łącznik (ang 'em' dash) używany jest do oddzielenia nazw składników w adduktach;

Przykład: tlenek wegla—metyloboran (PIN, P-13.35)

P-16.2. 5 Odstępy

W wielu rodzajach nazw odstępy są bardzo ważnym typem interpunkcji i jeśli nazwa tego wymaga muszą być użyte. Z drugiej strony użycie odstępów tam gdzie nie są wymagane może być mylące. Na przykład, nazwa podstawnikowa powinna być pisana w sposób ciągły od początku do końca, a różne jej części połączone łącznikami. Odstępy używa się w:

(a) nazwach kwasów i soli;

Przykłady: kwas octowy (PIN, patrz P-65.1.1.1)
4-etoksy-4-oksobutanian sodu (PIN, patrz P-65.6.3.3.5)

(b) nazwach klasowo-funkcyjnych;

Przykład: octan etylu (PIN, patrz P-65.6.3.2.1)
cyjanek 2-(karbonochlorydotioilo)benzoilu (PIN, patrz P-65.5.4)
chlorek 2-(karbonocyjanidotioilo)benzoilu
sulfotlenek butylowo-etylowy (patrz P-63.6)
1-(etanosulfonylo)butan (PIN)

(c) nazwach utworzonych z użyciem modyfikatora funkcji;

Przykłady: ketal etylowo-metylowy cykloheksanonu (patrz P-66.6.5.1.1)
1-etoksy-1-metoksycykloheksan (PIN)
oksym pentan-2-onu (patrz P-68.3.1.1.2)
(pentan-2-ylideno)hydroksyloamina (PIN)

(d) nazwach addytywnych;

Przykłady: tlenek etenu (P-63.5)
oksiran (PIN)

tlenek trimetylofosfanu (P-63.5)
trimetylo-λ^5-fosfanon (PIN, P-68. 3.2.3.1, P-74.2.1.4)

P-16.3 PRZEDROSTKI ZWIELOKROTNIAJĄCE 'DI', 'TRI' *etc*. *vs* 'BIS', 'TRIS' *etc*.

P-16.3.1 Przedrostki zwielokrotniające pochodzą z greckich i łacińskich nazw liczb (patrz P-14.2) i są podstawową metodą zapisu wielokrotności identycznych elementów struktury w nazwie chemicznej. Są one ściśle połączone z nawiasami, zwłaszcza nawiasami okrągłymi.

P-16.3.2 Ogólna metodologia

Ogólna metoda właściwego wyboru przedrostka ‘di’, ‘tri’, *etc*. czy ‘bis’, ‘tris’, *etc*. polega na wykonaniu następujących kroków, nie koniecznie w podanej kolejności:

(a) należy ustalić czy składnik, który ma być zwielokrotniony jest prosty czy zespolony. Prostymi składnikami są niepodstawione macierzyste wodorki takie jak naftalen; niepodstawione przedrostki takie jak etyl lub *t*-butyl; sfunkcjonalizowane wodorki macierzyste takie jak kwas benzenosulfonowy; lub zachowane nazwy takie jak kwas octowy. Wszystkie one są zwielokrotniane za pomocą przedrostków zwielokrotniających ‘di’, ‘tri’, *etc*.

(b) należy ustalić czy te proste składniki nomenklaturowe wymagają nawiasów (P-16.3.4) i wprowadzić je do nazwy;

(c) każdy składnik, który jest podstawiony bezwzględnie wymaga użycia formy zwielokrotniającej ‘bis’, ‘tris’, *etc*.;

(d) należy ustalić czy prosty składnik nomenklaturowy będzie niejednoznaczny z nawiasami lub bez nawiasów w przypadku zwielokrotnienia za pomocą przedrostków zwielokrotniających ‘di’, ‘tri’, etc. (patrz P-16.3.4).

P-16.3.3 Podstawowe przedrostki numeryczne ‘di’, ‘tri’, 'tetra', *etc*. używane są do wskazania wielokrotności:

(a) przyrostków funkcyjnych i skumulowanych, podstawowych lub modyfikowanych zamianą funkcji za wyjątkiem ‘kwas tiowy’ i ‘kwas ditiowy’ opisanych w P-16.3.6;

Przykłady: diol (patrz P-63.1.2)
kwas dikarboksylowy (patrz P-65.1.1.2.1)
kwas disulfonowy (patrz P-65.3.1)
diyl (patrz P-71.2.3)
diid (patrz P-72.2.2.1)
diium(patrz P-73.1.1.2)
kwas diperoksowy (patrz P-65.1.4.1)
kwas dipropanowy (patrz P-62.3.1.2)
kwas dikarboperoksowy (patrz P-65.1.4.1)
kwas diimidowy (patrz P-65.3.1.4)
kwas dikarbohydrazonowy (patrz P-65.1.3.2.1)
kwas disulfonoperoksowy (patrz P-65.3.1.2)
kwas disulfinoimidowy (patrz P-65.3.1.4)
kwas disulfonohydrazonoimidowy (patrz P-65.3.1.4)
ditioamid (patrz P-66.4.1.1)
diidoamid (patrz P-66.4.1.1)
dikarbohydrazonoamid (patrz P-66.4.2.
dikarboksyimidohydrazyd (patrz P-66.4.2.1)
dikarboksyimidoamid (patrz P-66.4.1.1)

(b) przedrostków prostych podstawników łącznie z macierzystymi wodorkami o końcówkach ‘en’ i ‘yn’ oraz grupami charakterystycznymi.

Przykłady: dicykloheksyl (patrz P-44.1.2)
dimetyl (patrz P-61.2.3)
di-*tert*-butyl (patrz P-61.2.3)
dietenyl (patrz P-61.2.3)
diimino (patrz P-62.3.1.2)
dibromo (patrz P-61.3.1

(c) przedrostków zamiany ‘a’ szkieletu

Przykłady: trisila (patrz P-15.4.3.2.1)
trioksa (patrz P-15.4.3.2.5)

(d) zwielokrotnionych składników z zachowanymi nazwami i nazwami systematycznymi innymi niż opisane w P-16.3.4(c), P-16.3.4(d) i P-16.3.4(e).

Przykłady: difenol (patrz P-15.3.2.1)
kwas dioctowy (patrz P-15.3.2.1; patrz także P-15.6.1.4)
kwas dipropanowy (patrz P-15.3.2.1)

(e) prostych modyfikatorów funkcji

Przykłady: dioksym (patrz P-68.3.1.1.2)
dihydrazyd (patrz P-66.3.5.2)

P-16.3.4 Okrągłe nawiasy ((patrz P-16.6.1) służą do zamykania zwielokrotnionych składników, które są:

(a) przedrostkami prostych podstawników z lokantami;

Przykłady: di(propan-2-yl) (preferowany przedrostek; patrz P-61.2.3)
tetra(naftalen-2-yl) (preferowany przedrostek; patrz P-61.2.3)

(b) przedrostkami prostych podstawników zmodyfikowanych końcówkami ‘en’ i ‘yn’ i mającymi lokanty;

Przykład: di(prop-1-en-2-yl) (preferowany przedrostek; patrz P-68.2.6.1)

(c) przedrostkami prostych podstawników i sfunkcjonalizowanymi macierzystymi wodorkami zaczynającymi się przedrostkiem zwielokrotniającym;

Jest to zmiana w porównaniu do wcześniejszych zaleceń zgodnie z którymi używano ‘bis’

Przykłady: di(dodecyl) (preferowany przedrostek; patrz P-68.2.6.1)
di(tridecyl) (preferowany przedrostek; patrz P-52.2.8)
di(tetradekan-14,1-diyl) (preferowany przedrostek multiplikacyjny; patrz P-15.3.2.1)

di(pentanal) (patrz P-68.2.6.2)

(d) prostymi podstawnikami i sfunkcjonalizownymi macierzystymi wodorkami zaczynającymi się od ‘dec’ w celu odróżnienia multiplikowanych grup od acyklicznych składników zawierających 12 do 19 atomów (patrz P-16.4.1.1)

Przykłady: di(decyl) (patrz P-57.1.1.1)
di(kwas dekanowy) (patrz P-15.3.2.1
tri(decyl) [preferowany przedrostek, wskazuje trzy grupy -$C_{10}H_{21}$, patrz P-61.2.3, tridecyl wskazuje grupę -$C_{13}H_{27}$, patrz P-57.1.1.1]
tetra(kwas dekanowy) (preferowany przyrostek, wskazuje cztery przyrostki kwasu dekanowego; kwas tetradekanowy określa przyrostek kwasowy z czternastoma atomami)

(e) sfukcjonalizowanymi macierzystymi wodorkami;

Przykłady: kwas di(benzeno-1-sulfonowy) (patrz P-15.3.2.1)
kwas di(cykloheksano-1-karboksylowy) (patrz P-15.3.2.1)

(f) Prostymi składnikami zawierającymi nawiasy;

Przykłady: 8,8′-oksydi(spiro[4.5]dekan (PIN; patrz P-15.3.2.1)
di(bicyklo[3.2.1]oktan-3-yl) (preferowany przedrostek; patrz P-44.2.1.1)
di([4-^{2}H]benzoil) (preferowany przedrostek, patrz P-83.1.2.2)

P-16.3.5 Numeryczne przedrostki ‘bis’, ‘tris’, ‘tetrakis’, *etc*. używane są do wskazania wielokrotności:

(a) przedrostków związków i kompleksowych (to znaczy podstawionych) przedrostków (patrz P-35.3 i i P-35.4);

Przykłady: bis(2-chloropropan-2-yl) (preferowany przedrostek; patrz P-61.3.1)
bis(dimetyloamino) (preferowany przedrostek; patrz P-62.5)
etano-1,2-diylobis(oksometylen) (preferowany przedrostek; patrz P-15.3.2.1)
bis(bromometylo) (preferowany przedrostek; patrz P-61.3.1)

(b) przyrostków ‘kwas tiowy’ i ‘kwas ditiowy’ oraz ich Se i Te analogów jako wyjątków do przyrostków opisanych w P-16.3.3 i P-16.3.4;

Przykłady: kwas bis(tiowy) [preferowany przyrostek, opisujący dwa przyrostki -C(O/S)H, patrz P-65.1.5.1 podczas gdy kwas ditiowy opisuje przyrostek -CSSH, patrz P-65.1.5.1]
kwas bis(ditiowy) (wstępnie wybrany przyrostek; patrz P-65.1.5.1) a nie kwas dieditiowy

(c) przyrostków utworzonych z dwóch lub więcej skumulowanych przyrostków;

Przykłady: bis(ylium) (preferowanyprzyrostek, opisuje dwa przyrostki ‘ylium’, patrz P-73.2.2.1; podczas gdy ‘diylium’ może opisywać przyrostek kationowego rodnika)
bis(nitrylium) (preferowany przyrostek, opisuje dwa przyrostki ‘nitrylium’, patrz P-73.1.2.1; podczas gdy ‘dinitrylium’może być interpretowane jako dwa przyrostki ‘nitryl’i jeden przyrostek ‘ium’)

(d) podstawionych modyfikatorów funkcji;

Przykłady: bis(fenylohydrazon) (patrz P-68.3.1.2.2)
bis(*O*-fenylooksym) pentano-2,4-dionu (patrz P-68.3.1.1.2)

(e) podstawionych związków macierzystych w nomenklaturze multiplikacyjnej
(f)

Przykłady: kwas bis(2-bromobenzoesowy) (patrz P-15.3.2.4.1)
bis[5-(1-chloroetylo)pirydyna] (patrz P-15.3.2.4.1)

P-16.3.6 Przedrostki ‘bis’, ‘tris’, ‘tetrakis’, *etc.* są także używane w celu uniknięcia dwuznaczności:
(a)przed mononuklernym podzbiorem w polinuklearnej acyklicznej strukturze;

Przykłady: bis(sulfanyl) (preferowany przedrostek; oznacza dwie grupy -SH, patrz P-63.1.5; podczas gdy disulfanyl oznacza grupę -SSH; patrz P-63.3.1)

tris(sulfanyl) (preferowany przedrostek; oznacza trzy grupy -SH; podczas gdy trisulfanyl oznacza grupę -SSSH, patrz P-68.3.1.3)
bis(λ^4-sulfanyl) (preferowany przedrostek; oznacza dwie grupy SH_3); nie di(λ^4-sulfanyl)

Uwaga: Podobnie postępuje się w przypadku analogicznych grup z Se, Te, N, As, Sb, Bi, Si, Ge, Sn, Pb, B, Al., Ga, In i Tl

bis(kwas fosfonowy) [wstępnie wybrana nazwa; opisuje dwa kwasy fosfonowe, patrz P-67.1.1.2, kwas difosfonowy opisuje kwas (HO)(O)PH-O-PH(O)(OH), patrz P-67.2.1]

bis(siarczan wodoru) [wstępnie wybrana nazwa, opisuje dwa aniony (siarczanowe wodoru) lub kwaśne estry, patrz P-76.1.3.2; wodorosiarczan jest nieorganiczną nazwą HSO_4^-, patrz ref. 12, **IR** 8.5]

tris(jodek) [wstępnie wybrana nazwa opisująca trzy jony, patrz ref. 12,**IR** 5.4.2.3; trijodek opisuje anion (I_3^-); patrz ref. 12, **IR** 5.4.2.3]

bis(fosforan) (wstępnie wybrana nazwa)

Przykład: 1,6-bis(fosforan) D-fruktofuranozy (patrz P-102.5.6.1.2)

(b) przed zachowanymi nazwami mononuklearnych diwalencyjnych podstawników takich jak ‘oksy’, ‘tio’ i ‘metylen’ w celu rozróżnienia zwielokrotnionych grup od łańcuchów (patrz P-15.3.1.2.2.1);

Przykłady:

bis(oksy) [preferowany przedrostek, określa dwie grupy -O-, patrz P-15.3.2.1; podczas gdy, używany w przeszłości, ‘diokso’, określałby grupę -OO-, patrz P-15.3.2.1]

bis(metylen) [preferowany przedrostek, oznaczający dwie grupy -CH_2- podczas gdy ‘dimetylen’ mógłby być użyty do oznaczenia grupy -CH_2-CH_2-, której właściwą nazwą jest etano-1,2-diyl (preferowany przedrostek) albo etylen; patrz P-29.6.2.3)

bis(azo) (preferowany przedrostek, oznaczający dwie grupy -N=N-, patrz P-68.3.1.3.2.3; podczas gdy ‘diazo’ oznacza jedną grupą =N_2, patrz P-61.4)

Przykład: kwas 3,3′-[metylenobis(azo)dipropanowy] (PIN)

bis(sulfonyl) (preferowany przedrostek, określający dwie grupy -SO_2-, patrz P-65.3.2.3; podczas gdy disulfonyl oznacza grupę -SO_2-SO_2-)

Przykład: 3,3′-[oksybis(sulfonylo)di(propan-1-ol) (PIN; patrz P-65.3.2.3)

bis(sufinyl) (preferowany przedrostek, oznacza dwie grupy -SO-, patrz P-65.3.2.3; podczas gdy disulfonal oznacza grupę -SO-SO-

Przykład: 3,3′-[azandiylobis(sulfinylo))]di(propan-1-amina)

(c) przed przedrostkami zamiany (‘a’) szkieletu, takimi jak ‘aza’, ‘oksa’, *etc*, używanymi do tworzenia nazw Hantzscha-Widmana i w nomenklaturze zamiennej (‘a’) szkieletu w celu wyraźnego opisania, w nazwie lub składniku nazwy, liczby zamieniających atomów;

Przykłady: benzo[1,2-*c*:3,4-*c*′]bis([1,2,5]oksadiazol) (PIN, oznacza dwa pierścienie ‘oksadiazolu’, patrz P-25.3.7.1; podczas gdy ‘benzo[1,2-*c*:3,4-*c*′]di[1,2,5]oksadiazol’ mógłby opisywać pięcioczłonowy pierścień z dwoma atomami tlenu i dwoma atomami azotu, patrz P-22.2.2.1.1)

bis(azacyklododekan) (PIN, oznacza dwa pierścienie ‘azacyklododekanu’, patrz P-22-2-3; podczas gdy nazwa diazacyklododekan opisuje pierścień cyklododekanu z dwoma atomami azotu, patrz P-23,2,3,2,2)

bis(1,2-oksazol-3-yl) [PIN ale di(izoksazol-3-il, patrz P-16.3.2 powyżej, bowiem di(1,2-oksazol-3-il, może być rozumiane jako układ pierścieni ‘dioksazol’, patrz P-22.2.2.1.1]

(d) w nomenklaturze skondensowanej przed dołączonymi składnikami dla odróżnienia przedrostka zwielokrotniającego od zwielokrotnionych przyłączonych składników skondensowania.

Przykłady: bis(benzo[*a*]antracen-1-yl) [PIN, opisuje dwa przedrostki ‘benzo[*a*]antracen-1-yl’, patrz P-61.2.4; podczas gdy dibenzo[*a*]antracen-1-yl może być interpretowany jako układ pierścieni dibenzoantracen, patrz P-25.3.4.2.1]

bis(cyklobuta[1,2-*c*]furan) [PIN, opisuje dwa układy pierścieniowe cyklobuta[1,2-*c*]furanu podczas gdy dicyklobuta[1,2-*c*] może być interpretowany jako układ pierścieni dicyklobutafuran, patrz P-25.3.6.1]

(e) przed nazwami zaczynającymi się od przedrostka zwielokrotniajacego ‘di’

Przykłady: bis(diazonium) (wstępnie wybrany przyrostek, patrz P-73.2.2.3) (nie didiazonium)

bis(diazenyl) (wstępnie wybrany przedrostek, patrz P-68.3.1.3.1) (nie didiazanyl)

bis(disulfanyl) (wstępnie wybrany przedrostek, patrz P-29.3.2.2, P-63.1.5 i P-63.4.2.2) (nie didisulfanyl)

tris(fosforan diwodoru) (wstępnie wybrana nazwa; patrz P-67.1.3.2) (nie fosforan tridiwodoru

P-16.4 INNE OKREŚLENIA LICZBOWE

P-16.4.1 Przedrostki liczbowe ‘bi’, ‘ter’, ‘kwater’ *etc* używane są głównie przy nazywaniu zespołów pierścieni (patrz P-28).

Przykłady: 1,1′-bifenyl (PIN, P-28.2.1)
$1^{2},2^{2}:2^{6},3^{2}:3^{6},4^{2}$-kwaterpirydyna (PIN, P-28.3.1)

P-16.4.2 W nazwach związków organicznych przedrostek ‘mono’jest zwykle pomijany. Używa się go natomiast do wskazania, że tylko jedna grupa charakterystyczna macierzystej struktury została zmodyfikowana. Końcówka ‘kis’ nigdy nie łączy się z ‘mono’.

Przykłady: kwas monoperoksyftalowy (patrz P-65.1.4.2)
kwas 2-karbonoperoksoilobenzoesowy (PIN; patrz P-65.1.4.2)
monotlenek węgla (PIN; patrz P-13.3.5)

P-16.4.3 Określenie ‘seskwi’ używane jest w znaczeniu: półtora razy większy. Nie używa się go jako przedrostka liczbowego w nazwach IUPAC ale może pojawić się jako ogólne określenie opisowe, na przykład ‘seskwisiloksany’.

P-16.5 NAWIASY

W celu jasnego przekazania w nazwie strukturę związku, w nomenklaturze chemicznej używane są nawiasy okrągłe ( ), nawiasy kwadratowe [ ] i nawiasy klamrowe { } oddzielające części nazwy dotyczące określonych cech strukturalnych. Należy odnotować, że chociaż nawiasy są

używane w ten sam sposób w nazwach związków organicznych i nieorganicznych, ale nie oznaczają tego samego we wzorach związków nieorganicznych.

Nawiasy nie mogą być pomijane w preferowanych nazwach IUPAC. W ogólnej nomenklaturze, tam gdzie nie prowadzi to do dwuznaczności, dla uproszczenia nazwy nawiasy mogą być pominięte.

P-16.5.1 Nawiasy okrągłe
P-16.5.2 Nawiasy kwadratowe
P-16.5.3 Nawiasy klamrowe

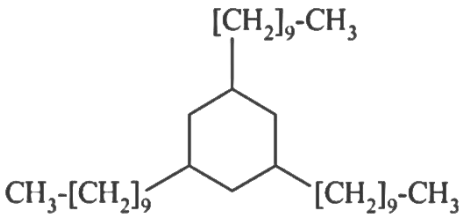
P-16.5.1 Nawiasy okrągłe

P-16.5.1.1 Nawiasy okrągłe używa się wokół przedrostków związków (patrz P-29.1.2) i kompleksów (patrz P-29.1.3); po przedrostkach zwielokrotniających ‘bis’, ‘tris’,etc; do zamknięcia zwielokrotnionego związku macierzystego składającego się z macierzystego wodorku i podstawnikowego przyrostka albo zwielokrotnionego podstawnikowego przyrostka nawet gdy są one poprzedzane podstawowym przedrostkiem liczbowym takim jak ‘di’, ‘tri’, etc.

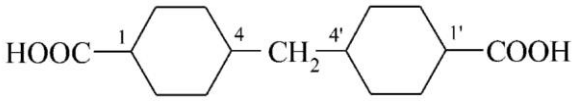
Przykłady:

$Cl\text{-}CH_2\text{-}SiH_3$ (chlorometylo)silan [PIN; nazwa chloro(metylo)silan opisywałaby strukturę: $Cl\text{-}SiH_2\text{-}CH_3$]

$(HO\text{-}CH_2\text{-}CH_2O)_2CH\text{-}COOH$ kwas bis(2-hydroksyetoksy)octowy (PIN)



1,3,5-tri(decylo)cykloheksan (PIN)
[nie 1,3,5-tris(decylo)cykloheksan]

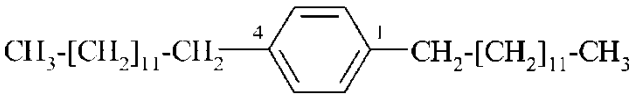


4,4′-metylenodi(kwas cykloheksano-1-karboksylowy) (PIN)

$H\{S/O\}C\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}C\{O/S\}H$
butanobis(kwas tiowy) (PIN)

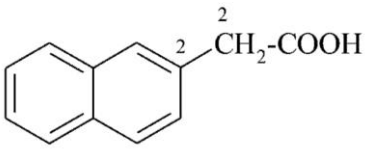
$-CH_2\text{-}[CH_2]_{12}\text{-}CH_2\text{-}O\text{-}CH_2\text{-}[CH_2]_{12}\text{-}CH_2-$

oksydi(tetradekano-14,1-diyl (preferowany przedrostek; uwaga: porządek podstawnikowych lokantów stosowany w nomenklaturze multiplikacyjnej)

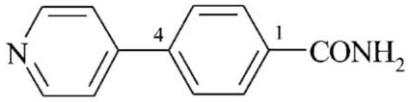


1,4-di(tridecylo)benzen (PIN)
1,4-fenylenodi(tridekan)

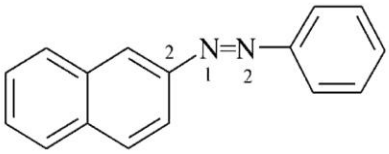
P-16.5.1.2 Nawiasy okrągłe używane są do zapisu prostych przedrostów podstawnikowych (patrz P-29.1) w celu oddzielenia tego samego typu lokantów odnoszących się do różnych elementów strukturalnych, nawet jeśli lokanty odnoszące się do określonej cechy strukturalnej nie są jawnie wymienione. Jest to szczególnie ważne, ponieważ lokanty przypisane do wolnych walencyjności były poprzednio umieszczane na początku nazwy związku; na przykład 2-naftyl.



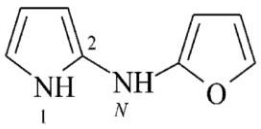
kwas (naftalen-2-ylo)octowy
(lokant '2' dla kwasu octowego nie jest wymieniany, patrz P-14.3.4.3)
kwas naftaleno-2-octowy



4-(pirydyn-4-ylo)benzamid (PIN)
[poprzednia nazwa 4-(4-pirydynylo)benzamid]
4-(pirydylo)benzamid



(naftalen-2-ylo)(fenylo)diazen (PIN; patrz P-63.3.3.2.2)
2-naftylo(fenylo)diazen

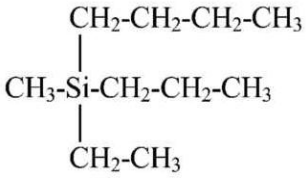


N-(furan-2-ylo)-1*H*-pirolo-2-amina (PIN)
(furan-2-ylo)(1*H*-pirol-2-ilo)amina
2-furylo(pirol-2-ilo)amina

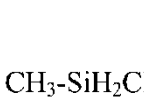
P-16.5.1.3 Okrągłe nawiasy umieszcza się wokół przedrostków określających, bez potrzeby użycia lokantów, proste podstawniki przed macierzystymi wodorkami i wokół przedrostów prostych podstawników z ich lokantami. Nawiasy okrągłe należy stosować możliwie oszczędnie.

Nawiasy nie są nigdy używane do nazwy prostego podstawnika wymienianego jako pierwszy.

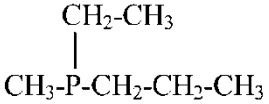
Przykłady



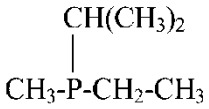
butylo(etylo)metylo(propylo)silan (PIN)



chloro(metylo)silan (PIN)

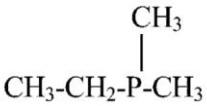


etylo(metylo)propylofosfan (PIN)



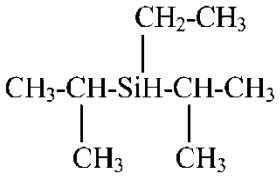
etylo(metylo)propan-2-ylo)fosfan (PIN)
etylo(izopropylo)metylofosfan

$ClCH_2\text{-}SiH_2\text{-}CH_3$ (chlorometylo)(metylo)silan (PIN; patrz P-68.2.6.1)



(bromometylo)(chlorometylo)silan (PIN; patrz P-68.2.6.1)

etylo(dimetylo)fosfan (PIN)

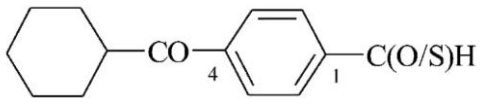


etylo[di(propan-2-ylo)]silan (PIN)

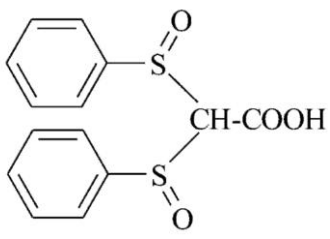
P-16.5.1.4 W celu uniknięcia niejednoznaczności wynikającej z pojawienia się dwóch macierzystych wodorków w nazwie podstawnikowej, wokół podstawników, włączając nazwę macierzystego wodorku, umieszcza się nawiasy okrągłe.

Tę zmianę, w stosunku do Przewodnika z 1993 roku (ref. 2), wprowadzono dla ułatwienia interpretacji nazw takich jak cykloheksanokarbonyl, w tym sensie, że chociaż są to proste przedrostki, mogą robić wrażenie występowania dwóch macierzystych wodorków

Przykłady:



kwas 4-(cykloheksanokarbonylo)benzeno-1-karbotiowy (PIN)



kwas di(benzenosulfinylo)octowy (PIN)

P-16.5.1.5 Tworząc nazwy amin z użyciem terminu ‘amina’ jako macierzystej struktury, gdy występuje kilka różnych podstawników, wokół przedrostków określających proste podstawniki sąsiadujące z tym terminem umieszcza się nawiasy okrągłe. Wymóg taki jest konieczny dla zapewnienia ścisłego określenia tego rodzaju nazwy aminy. W miarę potrzeby używane są inne nawiasy.

Przykłady: (2-chlorometylo)(propylo)amina (patrz P-62.2.2.1)
N-(2-chloroetylo)propan-1-amina (PIN)
butylo(etylo)propylo)amina (patrz P-62.2.2.1)
N-etylo-*N*-propylobutan-1-amina (PIN)
butylo(etylo)(metylo)amina (patrz P-62.2.2.1)
N-etylo-*N*-metylobutan-1-amina (PIN)

P-16.5.1.6 Nawiasy okrągłe są używane do wyodrębnienia drugiego lokantu w zespolonym lokancie, wokół lokantów oznaczających numerację pierścienia w nomenklaturze fanów i do zamknięcia identyfikatorów fullerenów.

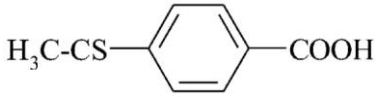
Przykłady: bicyklo[8.5.1]heksadeka-1(15),10-dien (PIN; patrz P-31.1.1.1)
1(1,3),4(1,4)-dibenzenacykloheptafan (PIN; patrz P-26.4.2.2)
(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren (PIN; patrz P-27.2.2)

P-16.5.1.7 Okrągłe nawiasy używa się do zaznaczenia: ‘dodanego wskazanego atomu wodoru’ i jego lokantu, stereodeskryptorów takich jak ‘*E*’, ‘*Z*’, ‘*R*’, ‘*S’*, etc. i deskryptorów izotopowo podstawionych związków.

Przykłady: fosfinin-2(1*H*)-on (PIN; patrz P-14.7.2)
(2*E*)-but-2-en (PIN; patrz P-93.4.2.1.1)
(^{13}C)metan (PIN; patrz P-82.2.1)

P-16.5.1.8 Okrągłe nawiasy są używane do wyjaśnienia modyfikacji spowodowanej przedrostkami zamiennymi funkcji.

Przykład:



kwas 4-(tioacetylo)benzoesowy
kwas 4-(etanotioilo)benzoesowy (PIN, patrz P-65.1.5.1)

P-16.5.1.9 Nawiasy okrągłe (lub inne nawiasy jeżeli nawiasy okrągłe są już obecne) umieszcza się wokół struktury macierzystej łącznie z przedrostkiem ‘di’lub ‘bis’ przed wielomacierzystymi układami (P-25.3.7.1) podstawionymi przez jeden podstawnik wymieniany jedynie jako przyrostek.

Przykłady:

kwas [benzo[1,2-*c*:3,4-*c*´]bis([1,2,5]oksadiazolo)]-5-karboksylowy (PIN; patrz P-65.1.2.2.2)

(benzo[1,2:4,5]di[7]annuleno)-2-karbonitryl (PIN; patrz P=65.5.1.1.3)

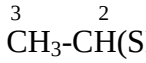
P-16.5.1.10 Okrągłe nawiasy używane są do wydzielenia określeń modyfikowanych przez liczbowe przedrostki ‘bis’, ‘tris’, ‘tetrakis’, *etc.*, opisane w P-16.3.6.

Przykład: disililometyl (preferowany przedrostek; patrz P-68.2.5)

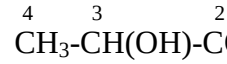
bis(silanylo)metyl

P-16.5.1.11 W liniowych wzorach okrągłe nawiasy są używane do wskazywania grup przyłączonych do łańcucha.

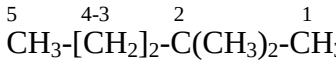
Przykłady:



propano-2-tiol (PIN)

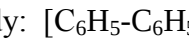


3-hydroksybutan-2-on (PIN)



2,2-dimetylopentan (PIN)

P-16.5.1.12 W strukturach rodnikowo-jonowych nawiasy okrągłe używane są w zapisie wielokrotnych kropek i ładunków.

Przykłady: 

[1,1′-bifenylo]dielid (PIN)
dirodnik dianion bifenylu
dirodnik jon(2-) bifenylu

P-16.5.2 Nawiasy kwadratowe

P-16.5.2.1 Nawiasy kwadratowe obejmują w skondensowanych układach pierścieni deskryptory wskazujące miejsca skondensowania, w nazwach policyklicznych układów pierścieni utworzonych według metody von Baeyera cyfry oznaczające długość mostków i łańcuchów łączących atomy spiro. Otaczają także nazwy zespołów pierścieni kiedy po nich występuje przyrostek głównej grupy albo skumulowany przyrostek; otaczają nazwy składników w nazwach spiranowych von Baeyera.

Przykłady:

nafto[2,1-*a*]azulen (PIN; patrz P-25.3.1.3)
bicyklo[3.2.1]oktan (PIN; patrz P-23.2.2)
spiro[4.5]dekan (PIN; patrz P-24.2.1)
[2,2′-bipirydyn]-5-yl (preferowany przedrostek, patrz P-29.3
spiro[cykloheksano-1,1′-inden] (PIN; patrz P-24.5.1)

P-16.5.2.2 Kwadratowe nawiasy obejmują lokanty opisujące cechy strukturalne składników, takie jak podwójne wiązania w mostkach i heteroatomy składowych pierścieni w nazwach skondensowanych układów pierścieni.

Przykład: 6,7-epiprop[1]en[1]yl[3]ylideno)benzo[*a*]cyklohepta[*e*][8]annulen (PIN; patrz P-25.4.3.4.2)
5*H*-pirydo[2,3-*d*][1,2]oksazyna [PIN; patrz P-25.3.2.4(d)]

P-16.5.2.3 Kwadratowe nawiasy obejmują cyfry określające wielkość pierścienia w annulenach i fullerenach

Przykłady: [10]annulen (patrz P-22.1.2)
cyklodeka-1,3,5,7,9-pentaen (PIN)
(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren (PIN; patrz P-27.2.2)

P-16.5.2.4 Nawiasy kwadratowe obejmują przedrostki podstawnikowe, dla których już użyto nawiasy okrągłe.

Przykład: kwas 4-[(hydroksyselanylo)metylo]benzoesowy (PIN; patrz P-63.4.2.2)

P-16.5.2.5 Nawiasy kwadratowe używane są do opisu deskryptorów związków izotopowo znakowanych.

Przykład: [^{13}C]metan (PIN; patrz P-83.1.2.1)

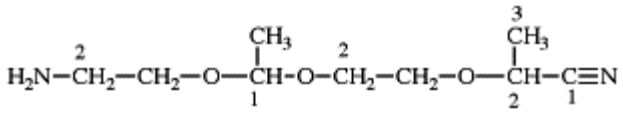
P-16.5.2.6 Nawiasy kwadratowe są stosowane we wzorach do wskazania powtarzającej się w łańcuchu grupy.

Przykład: CH_3-[CH_2]$_{68}$-CH_3 heptakontan (PIN; patrz P-21.2.1)

P-16.5.3 Nawiasy klamrowe

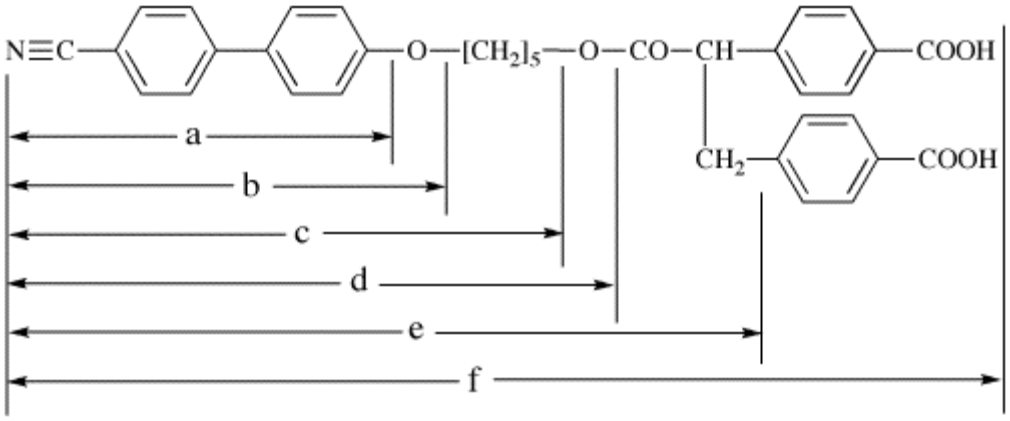
P-16.5.3.1 Nawiasy klamrowe używa się do zaznaczenia przedrostków podstawnikowych, dla których nawiasy okrągłe i kwadratowe zostały już wykorzystane.

Przykład:



2-{2-[1-(2-aminoetoksy)etoksy]etoksy}propanonitryl (PIN)

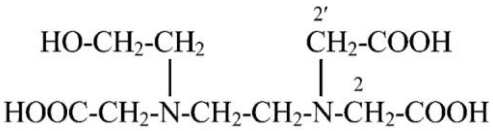
P-16.5.4 Kiedy zachodzi potrzeba użycia różnego rodzaju nawiasów porządek ich użycia jest następujący: {[({[( )]})]}, *etc.* Jak pokazano na **Rys.1.3**. Należy zauważyć, że występowanie kwadratowych nawiasów i/lub okrągłych nawiasów jako integralnej części nazwy struktury macierzystej nie ma wpływu na podaną tu kolejność.



(a) = 4′-cyjano[1,1′-bifenyl]-4-yl
(b) = (4′-cyjano[1,1′-bifenyl]-4-yl)oksy
(c) = 5-[(4′-cyjano[1,1′-bifenyl]-4-yl)oksy]pentyl
(d)= {5-[(4′-cyjano[1,1′-bifenyl]-4-yl)oksy]pentyl}oksy
(e) = 3-({5-[(4′-cyjano[1,1′-bifenyl]-4-yl)oksy]pentyl}oksy)-3-oksopropano-1,2-diyl
(f) = kwas 4,4′-[3-({5-[(4′-cyjano[1,1′-bifenyl]-4-yl)oksy]pentyl}oksy)-3-oksopropano-1,2--diylo]dibenzoesowy (PIN)

Rys. 1.3 Porządek wprowadzania nawiasów

Przykład:



kwas 2,2′-({2-[(karboksymetylo)(2-hydroksyetylo)amino]etylo} azanodiylo) dioctowy [*N*-(karboksymetylo)-*N*′-(2-hydroksyetylo)-*N*,*N*′-etano-1,2-diyloglicyna

P-16.5.4.1 Jeżeli podany porządek prowadzi do występowania po sobie nawiasów tego samego rodzaju należy użyć nawiasy następnego poziomu. Na przykład, z poprawnie zastosowanego porządku obejmowania podanego w P-16.5.4, wynika następująca nazwa:

kwas (3*S*)-2-{(2*S*)-2-[((2*S*)-1-etoksy-1-okso-4-fenylobutan-2-ylo)amino]propanoilo}-6,7-dimetoksy--1,2,3,4-tetrahydroizochinolino-3-karboksylowy

Ponieważ pierwszeństwo powinien mieć zestaw okrągłych nawiasów, w nazwie tej występują one po sobie. Deskryptor (2*S*) wymusza przejście do [ ] a następnym nawiasami po { } powinny być ponownie ( ). Kolejny deskryptor (2*S*) wymusza przejście do [ ]. Poprawną nazwą jest:

kwas (3*S*)-2-[(2*S*)-2-{[(2*S*)-1-etoksy-1-okso-4-fenylobutan-2-ylo]amino}propanoilo]-6,7-dimetoksy--1,2,3,4-tetrahydroizochinolino-3-karboksylowy (PIN).

Podobnie, przedstawiona poniżej nazwa wynika z poprawnego zastosowania hierarchii nawiasów podanej w P-16.5.4.

10-[((3*S*)-1-fosfabicyklo[2.2.2]oktan-3-ylo)metylo]-10*H*-fenoksazyna

Ponieważ pierwszeństwo mieć powinien zestaw okrągłych nawiasów, w tej nazwie występują one po sobie. Deskryptor (3*S*) wymusza przejście do [ ], tak że poprawną nazwą jest:

10-{[(3*S*)-1-fosfabicyklo[2.2.2]oktan-3-ylo]metylo}-10*H*-fenoksazyna (PIN)

Procedura ta jest zmianą wprowadzoną dla uproszczenia w sytuacji, która może mieć miejsce podczas postępowania ściśle według podanego porządku stosowania nawiasów, gdy konieczne jest użycie niezależnych nawiasów aby uwzględnić inne elementy takie jak stereodeskryptory. W rezultacie dwa lub więcej nawiasów tego samego rodzaju może wystąpić po sobie powodując niejednoznaczność.

P-16.6 PISANIE KURSYWĄ

Litery nie związane z podstawowym etapem alfanumerycznego porządkowania zaznacza się kursywą. W manuskryptach, kiedy kursywa jest niedostępna, przyjęto, że litery nią pisane wskazuje się przez podkreślenie.

P-16.6.1 Pisane kursywą małe litery w nazwach skondensowanych układów cyklicznych używane są w deskryptorach miejsc skondensowania.

Przykład: selenofeno[2,3-*b*]selenofen (PIN; patrz P-25.3.1.3)

Litery *o, m,* i *p* były używane zamiast, odpowiednio, *orto, meta* i *para* do oznaczania 1,2-, 1,3- i 1,4- dwupodstawionych izomerów benzenu. Postępowanie takie jest zdecydowanie odradzane i nie jest zalecane przy tworzeniu preferowanych nazwach IUPAC.

Przykłady: *o*-ksylen (patrz P-22.1.3)
1,2-ksylen (PIN)
1,2-dimetylobenzen
p-dinitrozobenzen (patrz P-61.5.1)
1,4-dinitrozobenzen (PIN)

P-16.6.2 Pisane kursywą symbole pierwiastków takich jak *O, N, As* są lokantami wskazującymi przyłączenie podstawnika do tych heteroatomów.

Przykłady:
N,*N*-dietyloetanoamina (PIN; patrz P-62.2.21)
heksanoselenian *O*-etylu (PIN; patrz P-65.6.3.3.1)

P-16.6.3 Pisany kursywą symbol pierwiastka *H* oznacza wskazany albo dodany atom wodoru.

Przykłady: 1*H*-azepin (PIN, patrz P-22.2.2.1.4)
chinolin-2(1*H*)-on (PIN, patrz P-64.3.1)

P-16.6.4 Pisane kursywą określenia, sylaby i duże łacińskie litery są używane w niektórych strukturalnych deskryptorach i stereodeskryptorach takich jak *'cis', 'trans', 'R', 'S', 'E', 'Z', 'r', 's', 'c', 't'* i '*retro'*.

Przykłady: *tert*- ale nie 'izo' (patrz P-29.6.3)
'*E*' i '*Z*' (patrz P-93.4.2.1.1); '*cis*' i '*trans*' (patrz P-93.5.2.2.2); '*r', 'c'*'i '*t*' (patrz P-93.5.1.3); '*r'*, i '*s*' (patrz P-93.5.1.1.2)
'*R*' i '*S*' (patrz P-93.1.1), '*R**' (wymawia się R-gwiazdka), '*S**' (wymawia się S-gwiazdka), '*r*', '*s'* (patrz P-93.1.2.1),'*rel*' (patrz P-93.1.2.1)
'*mezo*'(patrz P-102.5.6.5.2), '*ambo*' (patrz P-93.1.4), '*rac*' (patrz P-93.1.3)
'*M*' i '*P*', R_a i S_a, R_p i S_p (patrz P-93.4.2.2 i P-93.5.5.1) '*TPY*-3', '*TS*-3', '*SS*-4', '*TBPY*', '*SPY*' i '*OC*' (patrz P-93.3)
'*retro*', ale nie 'abeo', 'apo', 'cyclo', 'de', 'des', 'homo', 'nor' i 'seko'(patrz od P-101.3.1 do P-101.3.7)

P-16.7 USUWANIE SAMOGŁOSEK

P-16.7.1 Samogłoski są zawsze pomijane w następujących miejscach:

(a) W nazwach Hantzscha-Widmana końcowa litera 'a' w przedrostkach 'a' kiedy następuje po niej samogłoska.
Przykłady: 1,3-tiazol (PIN, patrz P-22.2.2.1.3)
(nie 1,3-tiaazaol)

1,6,2-dioksazepan (PIN, patrz P-22.2.2.1.3)
(nie 1,6,2-dioksaazaepan)

(b) końcowa litera 'a' w nazwach liczbowych przedrostków zwielokrotniających kiedy występuje po nich przyrostek zaczynający się od litery 'a' lub 'o';
Przykłady: [1,1′-bifenylo]-3,3′,4,4′-tetramina (PIN, patrz P-62.2.4.1.2)
(nie [1,1'-bifenylo]-3,3′,4,4′-tetraamina)

benzenoheksol (PIN, patrz P-63.1.2)
(nie benzenoheksaol)

(c) końcowa litera 'a' przedrostka 'a' pierwiastka, w nazwie powtarzającej się jednostki 'a(ba)$_n$', gdy występuje po niej samogłoska;
Przykłady: disiloksan (wstępnie wybrana nazwa, patrz P-21.2.3.1)
(nie disilaoksan)

tetrastannooksan (wstępnie wybrana nazwa, patrz P-21.2.3.1)
(nie tetrastannaoksan)

(d) końcowa litera 'o' w 'benzo' w nazwach 'benzoheterocykli' utworzonych przez skondensowanie pierścienia benzenu do heteromonocyklu, którego nazwa zaczyna się samogłoską [wyjątek w P-16.7.2(g)].
Przykłady: 3-benzoksepin (PIN, patrz P-25.2.2.4)
4*H*-3,1-benzoksazyna (PIN, patrz P-25.2.2.4)

P-16.7.2 W następujących przypadkach nie usuwa się końcowej samogłoski:

(a) w nazwach łączonych;

Przykład: kwas benzenooctowy (patrz P-15.6.1.1)
kwas fenylooctowy (PIN)

(b) z przedrostków zamiany i liczbowych przedrostków zwielokrotniających w nomenklaturze zamiennej (‘a’) szkieletu;

Przykład: 2,4,6,8-tetrasilaundekan-11-yl (PIN, patrz P-15.4.3.2.2)

(c) z przedrostków zwielokrotniających w homogenicznych acyklicznych wodorkach macierzystych innych niż węglowodory i wodorki boru;

Przykład: nonaazan (patrz P-21.2.2)
(nie nonazan)

(d) z przedrostków zwielokrotniających w multiplikacyjnych związkach macierzystych;

Przykład: kwas 2,2′,2″,2‴-(etano-1,2-diylodinitrylo)tetraoctowy
N,*N*′-etano-1,2-diylobis[*N*-(karboksymetylo)glicyna

(e) z liczbowych przedrostków zwielokrotniających przed nazwami przedrostków podstawnikowych;

Przykład: kwas 5,6,7,8-tetrajodo-1,2,3,4-tetrahydroantraceno-9-karboksylowy (PIN, patrz P-65.1.2.4)

(f) ze składników przedrostków związku (patrz P-29.1.2) i kompleksowych przedrostków (patrz P-29.1.3) przed następującymi przedrostkami zaczynającymi się od samogłoski;

Przykłady: chloroamino (wstępnie wybrana nazwa, patrz P-35.3.1)

aminooksy (wstępnie wybrana nazwa, patrz P- 68.3.1.1.1.5)

(g) w nomenklaturze skondensowanej z przedrostków oznaczających przyłączone składniki; na przykład końcowa litera ‘o’ w acenafto, benzo, perylo, fenantro i końcowa litera ‘a’ w antra, cyklopropa, cyklobuta nie są usuwane przed samogłoskami [wyjątek dotyczący ‘benzo’ patrz P-16.8.1(f)].

To zalecenie jest zgodne z P-25.3.1.3 i regułą R-2.4.1.1 zamieszczoną w Przewodniku z 1993 roku (ref. 2), która zniosła usuwanie zalecane w regule A-21.4 zawartą w wydaniu z 1979 roku (ref. 1)

Przykłady:

cyklopropa[*de*]antracen (PIN, patrz P-25.3.8.1)

nafto[1,2-*a*]azulen (PIN, P-25.3.1.3)

P-16.8 DODAWANIE SAMOGŁOSEK

P-16.8.1 W nomenklaturze zamiennej funkcji, ze względów eufonicznych, pomiędzy spółgłoski wstawia się samogłoskę ‘o’.

Przykłady: kwas etanosulfonodiimidowy (PIN, patrz P-65.3.1.4)
(nie kwas etansulfondiimidowy)

heksa-1,3-dien-5-yn (PIN, patrz P-31.1.2.2.1)
(nie heks-1,3-dien-5-yn)

P-16.8.2 Ze względów eufonicznych wstawia się literę ‘a’ pomiędzy rdzeniem nazwy polienów, poliynów oraz polienynów i liczbowym przedrostkiem zwielokrotniającym ‘di’, ‘tri’, etc. poprzedzającym końcówkę ‘en’ lub ‘yn’.

Przykłady: buta-1,3-dien (PIN, patrz P-31.1.1.2)
(nie but-1,2-dien)

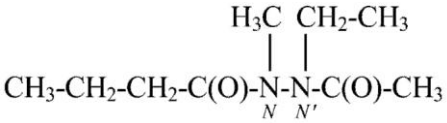
heksa-1,3-dien-5-yn (PIN, patrz P-31-1.2.2.1)
(nie heks-1,3-dien-5-yn)

P-16.9 PRIMOWANIE

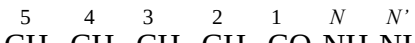
W preferowanych nazwach IUPAC primy, podwójne primy, etc., czasem z cyframi arabskimi w indeksie górnym stanowiące lokanty macierzystej struktury, do której grupa jest dołączona, dodawane są do lokantów i symboli bez odstępów i nie są pisane kursywą nawet po kursywie. Gdy potrzeba więcej niż trzech primów wymienia się je w grupie po trzy.

P-16.9.1 Primy (′), podwójne primy (″), potrójne primy (‴), etc. są używane do różnicowania atomów azotu hydrazydów (patrz P-66.3), imidoamidów (amidyn) (patrz P-66.4.1), amidrazonów (patrz P-66.4.2) i hydrazydyn (patrz P-66.4.2).

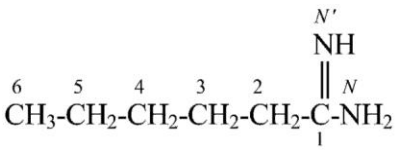
Przykłady:



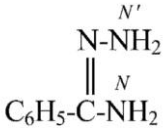
N′-acetylo-*N*″-etylo-*N*-metylobutanohydrazyd (PIN, patrz P-66.3.3.2)



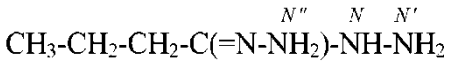
pentanohydrazyd (PIN, patrz P-66.3.1.1)



heksanoimidoamid (PIN, patrz P-68.4.1.1)
(zarzucono heksanoanamidyna)



benzenokarbohydrazonoamid (PIN, patrz P-66.4.2.1)

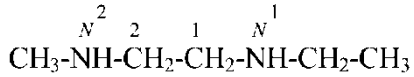


butanohydrazonohydrazyd (PIN, patrz P-66.4.3.1)

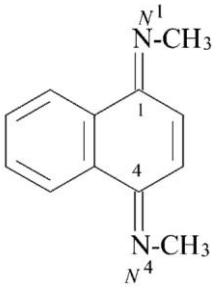
P-16.9.2 Arabskie cyfry w indeksie górnym są lokantami macierzystej struktury i są używane do różnicowania atomów di- i poliamin, di- i poliimin, di- i poliamidów z wyjątkiem geminalnych amin, imin i amidów.

Arabskie cyfry w indeksie górnym używa się obecnie do różnicowania atomów azotu w symetrycznych geminalnych diaminach, diiminach, diamidach, di(imidoamidach), imidohydrazydach i poliimidopolikarbonowych i nieorganicznych oksokwasów, tam gdzie poprzednio używano primy (′), podwójne primy (″), potrójne primy (‴), *etc.*

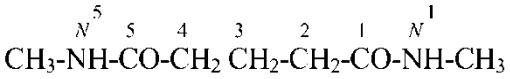
Przykłady:



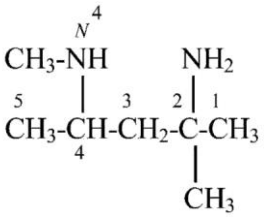
N[1]-etylo-*N*[2]-metyloetano-1,2-diamina (PIN)
N-etylo-*N*'metyloetano-1,2-diamina



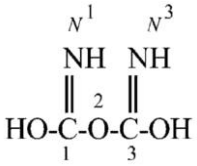
N[1],*N*[4]-dimetylonaftaleno-1,4-diimina (PIN, patrz P-62.3.1.1)
N,*N*'-dimetylonaftaleno-1,4-diimina (patrz także P-58.2.2.3)
N,*N*'-dimetylo-1,4-dihydronaftaleno-1,4-diimina



N[1],*N*[5]-dimetylopentanodiamid (PIN)
N,*N*'-dimetylopentanodiamid



N[4],2-dimetylopentano-2,4-diamina (patrz P-62.2)



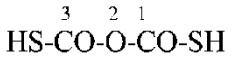
kwas 1,3-diimidodikarbonowy (PIN)

Arabskie cyfry w indeksie górnym są również używane do rozróżniania atomów chalkogenów w polinuklearnych organicznych i nie organicznych oksokwasach.

Używanie literowych lokantów z indeksem górnym jest odejściem od

poprzedniej praktyki kiedy to liczbowe lokanty umieszczano przed literowym lokantem na przykład 1-*O*, i 3-*O* jak opisano w ref.1, reguła C-213.1

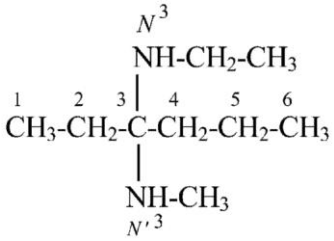
Przykład:



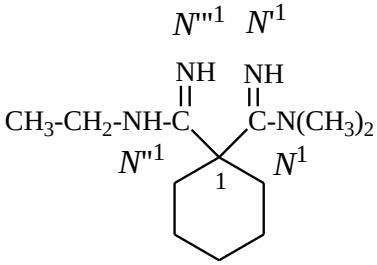
S^{1},*S*^{3}-kwas 1,3-ditiodikarbonowy
(nie 1-*S*,3-*S*-kwas 1,3-ditiodikarbonowy)

P-16.9.3 Primy (′), podwójne primy (″), potrójne primy (‴). etc., z liczbowymi lokantami w indeksie górnym wskazującymi pozycje przyrostka w macierzystej strukturze, są używane do różnicowania atomów azotu w przypadkach innych niż wymienione powyżej w P-16.9.1 i P-16.9.2, zwłaszcza gdy warunek symetrii nie jest spełniony.

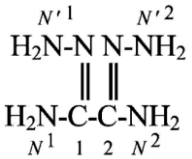
Przykłady:



N^{3}-etylo-*N*′^{3}-metyloheksano-3,3-diamina (PIN)
N-etylo-*N*′-metyloheksano-3,3-diamina

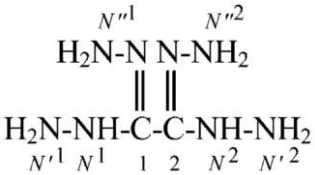


N″^{1}-etylo-*N*^{1},*N*^{1}-dimetylocykloheksano-1,1-dikarboksyimidoamid (PIN, patrz P-66.4.1.4.2)
N″-etylo-*N*,*N*-dimetylocykloheksano-1,1-dikarboksyimid

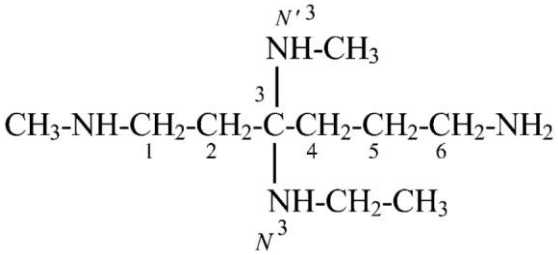


etanodihydrazonoamid (PIN, P-66.4.2.1)

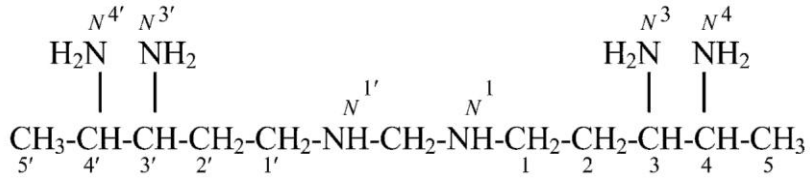
etanodiimidohydrazyd (PIN, P-66.4.2.1)



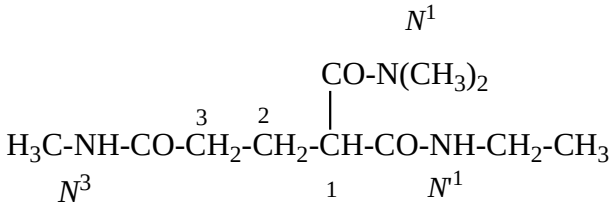
etanodihydrazonohydrazyd (PIN, P-66.4.3.1)



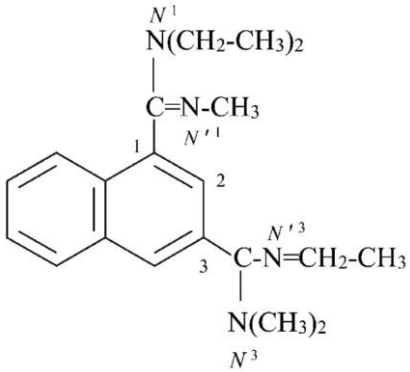
N^3-etylo-N^1,N'^3-dimetylo(heksano-1,3,3,6-tetraylotetraamina) (PIN, patrz P-62.2.4.1.2)
N^3-etylo-N^1,N'^3-dimetylo(heksano-1,3,3,6-tetraylotetraamina)



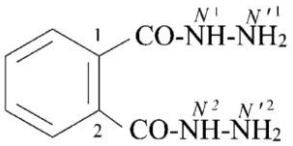
N^1,$N^{1'}$-metylenodi(pentano-1,3,4-triamina) (PIN, patrz P-62.2.5.2)



N'^1-etylo-N^1,N^1,N^3-trimetylopropano-1,1,3-trikarboksyamid (PIN, patrz P-66.1.1.3.1.2)



N^1,N^1,N'^3-trietylo-N'^1,N^3,N^3-trimetylonaftaleno-1,3-dikarboksyimidoamid (PIN, patrz P-66.4.1.4.2)



benzeno-1,2-dikarbohydrazyd
(PIN, patrz P-66.3.1.2.2)

P-16.9.4 Primy (′), podwójne primy (″), potrójne primy (‴). etc., są używane także do rozróżniania identycznych lokantów innych niż lokanty *N*, na przykład: 1, 1′, 1″, 4′a (nie 4a′; przy lokantach skondensowania primy są dodawane po cyfrach a nie literach). Takie zastosowanie ma miejsce:

(a) w nomenklaturze multiplikacyjnej do wskazania zwielokrotnionych jednostek i odpowiedniego zmodyfikowania lokantów;

Przykład: 2,2′,2″-nitrylotri(etan-1-ol) (PIN, patrz P-15.3.2.1)

(b) w związkach spiro-skondensowanych do wskazania takich samych lub różnych pozycji w układach policyklicznych;

Przykłady: 7,7′-spirobi[bicyklo[4.1.0]heptan] (PIN, patrz P-24.3.1)
1*H*,1′*H*,1″*H*, 3′*H*-2,2′:7′,2″-dispiroter[naftalen] (PIN, patrz P-24.4.1)
spiro[cykloheksano-1,1′-inden] (PIN, patrz P-24.5.1)

(c) w zespołach pierścieni do numerowania identycznych składników pierścieniowych;

Przykłady: 1,1′-bi(cyklopropan) (PIN, patrz P-28.2.1)
1,1′-bifenyl (PIN, patrz P-28.2.1)
3a,3′a-biinden (PIN, patrz P-28.2.3)

P-16.9.5 Inne użycie primów

(a) w nomenklaturze skondensowanej do określenia pierwszego i wyższego z przyłączonych składników, identycznych przyłączonych składników i wielomacierzystych nazw;

Przykłady: pirydo[1″,2″:1,2]imidazo[4′,5′:5,6]pirazyno[2,3-*b*]fenazyna (PIN, patrz P-25.3.4.1.1)
difuro[3,2-*b*:2′,3′-*e*]pirydyna (PIN. Patrz P-25.3.4.1.2)
cyklopenta[1,2-*b*:5,1-1-*b*′]bis([1,4]oksatiin) (PIN, patrz P-25.7.1)

(b) w nazwach fullerenów *orto*-skondensowanych do organicznego pierścienia lub układu pierścieniowego w celu określenia pozycji nie-fullerenowego składnika;

Przykład: 3′*H*-cyklopropa[1,9](C_{60}-I_h)[5,6]fulleren (PIN, patrz P-27.6.1)

(c) W nomenklaturze produktów naturalnych do określenia pozycji w pierścieniu lub pierścieniach skondensowanych z podstawowym wodorkiem macierzystym;

Przykład: nafto[2′,1′:2,3]-5α-androstan (PIN, patrz P-101.5.1.1)

P-16.9.6. Wielokrotne primowanie

Dla zespołów pierścieni i związków polispiranowych mogą być potrzebne długie ciągi primów, które są trudne do policzenia. Na przykład ile primów jest w ciągu: ″″″″″ ? Jest ich osiem. Dla uproszczenia liczenia, w tych zaleceniach, długie ciągi primów dzieli się na grupy trójek, np. ‴ ‴ ″, tak jak poprzednio – osiem. Jest to zmiana w stosunku do publikacji o związkach spiro (odn.8), w której wielokrotne primy były dzielone na czwórki.

ROZDZIAŁ P-2 WODORKI MACIERZYSTE

P-20 Wprowadzenie
P-21 Mononuklearne i acykliczne polinuklearne wodorki macierzyste
P-22 Monocykliczne wodorki macierzyste
P-23 Policykliczne wodorki macierzyste (rozszerzony system von Baeyra)
P-24 Układy pierścieni spiranowych
P-25 Układy pierścieni skondensowanych i mostkowych skondensowanych
P-26 Nomenklatura fanów
P-27 Fullereny
P-28 Zespoły pierścieni
P-29 Przedrostki wskazujące podstawniki utworzone z macierzystych wodorków

P-20 WPROWADZENIE

Macierzysty wodorek jest strukturą, której nazwa po dodaniu afiksów wskazujących podstawniki utworzy nazwę określonego związku. Nazwa macierzystego wodorku precyzyjnie określa liczbę atomów wodoru dołączonych do jego szkieletu. Acykliczne wodorki macierzyste są zawsze nasycone i nierozgałęzione, na przykład pentan i trisilan. Cykliczne wodorki macierzyste są albo całkowicie nasycone, na przykład cyklopentan, cyklotrisiloksan, azepan, bicyklo[3.2]oktan i spiro[4.5]dekan albo całkowicie nienasycone, to znaczy, że mają maksymalną liczbę nieskumulowanych wiązań podwójnych, na przykład benzen, pirydyna, 1,3-oksazol, 1*H*-fenalen, fenantrolina i benzo[*a*]akrydyna. Istnieją również wodorki macierzyste częściowo nasycone, na przykład spiro[1,3-dioksolano-2,1′-[1*H*]inden] a także kombinacje cyklicznych i acyklicznych wodorków, o zachowanych nazwach tradycyjnych, na przykład toluen.

W tych rekomendacjach nazwy wodorków macierzystych nie zawierających w szkielecie atomów węgla, na przykład trisilan, nie są zalecane jako preferowane nazwy IUPAC. Są natomiast określane nazwami wstępnie wybranymi, to znaczy, że są używane do tworzenia preferowanych nazw IUPAC pochodnych podstawionych organicznymi (zawierającymi atomy węgla) podstawnikami (patrz P-12.2). Jednakże mogą się one stać preferowanymi nazwami IUPAC w zależności od decyzji zespołu powołanego do wskazania preferowanych nazw IUPAC nieorganicznych (nie zawierających atomów węgla) związków.

Nazwy wodorków macierzystych są albo zachowanymi nazwami tradycyjnymi albo nazwami systematycznymi utworzonymi zgodnie z określonymi regułami. Reguły i nazwy muszą być jednoznaczne i klarowne. Osiągnięcie tego celu i otrzymanie prostych i zwięzłych reguł wyboru preferowanych nazw IUPAC, wstępnie wybranych nazw macierzystych wodorków i przedrostków wskazujących podstawniki pochodzące od macierzystych wodorków, nie jest przedstawione w tym Rozdziale. Te reguły będą podane w Rozdziale P-5.

P-21 MONONUKLEARNE I ACYKLICZNE POLINUKLEARNE WODORKI MACIERZYSTE

P-21.1 Mononuklearne wodorki macierzyste
P-21.2 Acykliczne polinuklearne wodorki macierzyste

P-21.1 MONONUKLEARNE WODORKI MACIERZYSTE

P-21.1.1 Mononuklearne wodorki macierzyste o standardowej wiązalności

P-21.1.1.1 Nazwy systematyczne

W Tablicy 2.1 podano nazwy mononuklearnych wodorków pierwiastków, używanych jako wodorki macierzyste przy tworzeniu nazw związków organicznych za pomocą nomenklatury podstawnikowej. Większość z nich jest tworzona systematycznie przez wymienienie członu ‘a’ pierwiastka (patrz Tablica 2.4), usunięcie końcowej litery ‘a’ i dodanie końcówki ‘an’ (wzorowane na ‘metan’), na przykład boran dla BH_3, silan dla SiH_4, *etc*. Są jednak ważne wyjątki: oksydan dla H_2O_2 , sulfan dla H_2S, selan dla H_2Se, tellan dla H_2Te, polan dla H_2Po i bizmutan dla BiH_3 (patrz Tabela 2.1). Systematycznie utworzone nazwy: oksan, tian, selenan, telluran, polonan i bizman są nazwami Hantzscha-Widmana oznaczającymi odpowiednie nasycone sześcioczłonowe pierścienie z jednym heteroatomem. Nazwa ‘karban’ nigdy nie była używana zamiast ‘metan’ i nie jest zalecana.

Tabela 2.1 Nazwy systematyczne mononuklearnych macierzystych wodorków pierwiastków z grup 13, 14, 15, 16 i 17, o normalnej wiązalności (wszystkie nazwy systematyczne, z wyjątkiem ‘karban’, są nazwami wstępnie wybranymi; patrz P-12.2; zachowana jest nazwa ‘metan’ patrz P-21.1.1.2).

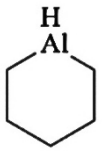
Grupa	**13**	**14**	**15**	**16**	**17**
	BH_3 boran	CH_4 (karban)*	NH_3 azan	OH_2 oksydan	FH fluoran
	ALH_3 aluman	SiH_4 silan	PH_3 fosfan	SH_2 sulfan	ClH chloran
	GaH_3 gallan	GeH_4 german	AsH_3 arsan	SeH_2 selan	BrH broman
	InH_3 indygan	SnH_4 stannan	SbH_3 styban	TeH_3 tellan	IH jodan
	TlH_3 talan	PbH_4 plumban	BiH_3 bizmutan	PoH_2 polan	AtH astatan

* Uwaga: metan jest preferowaną nazwa IUPAC. W kwestii nazw zwyczajowych stosowanych w nomenklaturze IUPAC związków organicznych i nieorganicznych patrz P-21.1.1.2 .

Zaleca się nowe, utworzone systematycznie nazwy, gallan i tallan. Aluman i indigan są wyjątkami. Nazwa ‘aluminan’ jest niejednoznaczna, ponieważ może oznaczać mononuklearny wodorek AlH_3 i nasycony sześcioczłonowy pierścień z jednym atomem glinu, którego nazwa Hantzscha-Widmana wskazana jest końcówką ‘-inan’. Odrzucić należy również używaną często nazwę ‘alan’ ponieważ utworzona z niej systematycznie nazwa podstawnika H_2Al- ‘alanyl’ oznacza od dawna grupę acylową wywodzącą się z aminokwasu alaniny. Nazwa ‘aluman’ nie ma tych wad. Przedrostek ‘aluma’ jest zalecany do tworzenia nazw Hantzscha-Widmana, tak więc nazwa ‘aluminan’ oznacza nasycony sześcioczłonowy pierścień zawierający jeden atom glinu (patrz P-22.2.2). Systematycznie utworzona nazwa ‘indan’ nie może być używana ponieważ oznacza już częściowo nasycony, bicykliczny skondensowany węglowodór. Reich i Richter (ref. 20) w 1863 roku odkryli nowy pierwiastek, który po przeprowadzeniu próby płomieniowej nazwali indium. Zaobserwowali bowiem zabarwienie płomienia na kolor indyga, różny od koloru wywoływanego przez cez. Uwzględniając indygo jako źródło nazwy, ‘indygan’ wydaje się być właściwą nazwą i jest zalecany dla wodorku InH_3.

Przykłady:

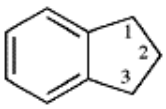
AlH_3



aluman (nazwa wstępnie wybrana patrz P-12.2) (nie alan)

aluminan (PIN)

InH_3



indygan (nazwa wstępnie wybrana, patrz P-12.2)

indan
2,3-dihydro-1*H*-inden (PIN)

Nazwy monowodorków wymienione w Tabeli 2.1 stanowią podstawę ‘uogólnionej nomenklatury an’. Nomenklatura podstawnikowa, tak jak stosowano ją w przypadku alkanów, cykloalkanów i policykloalkanów, była systematycznie rozszerzana na wodorki pierwiastków grup 13, 14, 15, 16 i 17. Uogólniona nomenklatura ‘an’ dzieli się na ‘nomenklaturę karbanową’, która dotyczy tradycyjnej nomenklatury podstawnikowej wodorków macierzystych węgla i ‘nomenklaturę heteranową’, która obejmuje atomy inne niż węgiel, określane tu jako heteroatomy.

P-21.1.1.2 Nazwy zachowane

Zachowuje się nazwę zwyczajową metan. Nazwy zwyczajowe woda, amoniak, dwuczłonowe nazwy dla wodorokwasów grupy 17, na przykład chlorowodór i dwuczłonowe nazwy dla wodorków grupy 16, na przykład siarkowodór są używane w tych zaleceniach. Użycie ich jako preferowanych nazw IUPAC zawiesza się do chwili opublikowania zaleceń dotyczących wyboru preferowanych nazw nieorganicznych. Tak że do zawierających je nazw (patrz P-14.8) nie będzie przypisywane określenie PIN. Jednakże systematyczne alternatywy nazw zwyczajowych, na przykład oksydan dla wody i azan dla amoniaku, i dla dwuczłonowych nazw wodorokwasów grupy 17 i wodorków grupy

16, na przykład chloran dla chlorowodoru i sulfan dla siarkowodoru, są niezbędne dla nazywania pewnych pochodnych i tworzenia nazw rodników, jonów a także polinuklearnych homologów.

Nazwy ‘fosfina’ dla PH_3, ‘arsyna’ dla AsH_3, ‘stybina’ dla SbH_3 i ‘bizmutyna’ dla BiH_3 są zachowane w ogólnej nomenklaturze.

P-21.1.2 Mononuklearne wodorki macierzyste z niestandardową wiązalnością

P-21.1.2.1 Nazwy systematyczne i zwyczajowe

Kiedy wiązalność pierwiastka różni się od standardowej, zdefiniowanej w P-14.1 i zobrazowanej przykładami w Tabeli 2.1, nazwę wodorku modyfikuje się przez dołączenie do niej nazwy symbolu λ^n, w którym n wskazuje wiązalność (ref.10).

Nazwy ‘fosforan’ dla PH_5, ‘arsoran’ dla AsH_5 i ‘styboran’ dla SbH_5 zachowuje się do stosowania w ogólnej nomenklaturze. Jednakże nazwy ‘sulfuran’ dla SH_4, ‘selenuran’ dla SeH_4, ‘jodynan’ dla IH_3, ‘persulfuran’ dla SH_6 i ‘perjodynan’ dla IH_5, które były używane do niedawna w literaturze, nie są zalecane.

Przykłady:

IH_3

λ^3-jodan (nazwa wstępnie wybrana, patrz P-12.2)
(nie jodynan)

SH_4

λ^4-sulfan (nazwa wstępnie wybrana, patrz P-12.2)
(nie sulfuran)

SnH_2

λ^2-stannan (nazwa wstępnie wybrana, patrz P-12.2)

PH_5

λ^5-fosfan (nazwa wstępnie wybrana, patrz P-12.2)
fosforan

AsH_5

λ^5-arsan (nazwa wstępnie wybrana, patrz P-12.2)
arsoran

SbH_5

λ^5-styban (nazwa wstępnie wybrana, patrz P-12.2
styboran

P-21.2 ACYKLICZNE POLINUKLEARNE WODORKI MACIERZYSTE

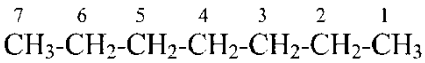
P-21.2.1 Węglowodory
P-21.2.2 Homogeniczne acykliczne wodorki macierzyste inne niż węglowodory i wodorki boru
P-21.2.3 Heterogeniczne acykliczne wodorki macierzyste
P-21.2.4 Acykliczne wodorki macierzyste zawierające heteroatomy o niestandardowej wiązalności

P-21.2.1 Węglowodory

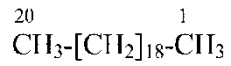
Nasycone nierozgałęzione węglowodory C_2H_6, C_3H_8 i C_4H_{10} mają zachowane nazwy, odpowiednio, etan, propan i butan. Nazwy systematyczne wyższych przedstawicieli tej serii składają się z członu liczbowego (patrz Tabela 1.4) i występującej po nim końcówki ‘an’. Końcowa litera ‘a’ w członie liczbowym jest pomijana.

Ogólną nazwą nasyconych acyklicznych węglowodorów (rozgałęzionych i nierozgałęzionych) jest ‘alkan’. Ich łańcuch numeruje się od jednego końca do drugiego cyframi arabskimi. Kwadratowe nawiasy używa się we wzorach do wskazywania powtarzających się grup w łańcuchu. Nienasycone acykliczne węglowodory opisano w P-31.1.

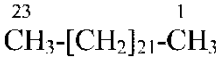
Przykłady:



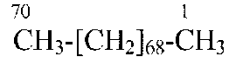
heptan (PIN)



ikozan (PIN)
(w indeksach Beilsteina i CAS występuje nazwa ‘eikozane’)



trikozan (PIN)

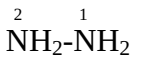


heptakontan (PIN)

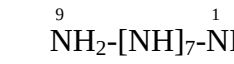
P-21.2.2 Homogeniczne acykliczne wodorki macierzyste inne niż węglowodory i wodorki boru

Związek o nierozgałęzionym łańcuchu zawierającym dwa lub więcej identycznych heteroatomów nasyconych atomami wodoru nazywany jest przez wymienienie odpowiedniego przedrostka zwielokrotniającego z Tabeli 1.4 (bez pomijania końcowej samogłoski w zwielokrotniającym przedrostku), a po nim nazwy odpowiedniego wodorku według P-21.1. Nazwy te są wstępnie wybrane (patrz P-12.2). Możliwość pojawienia się grup funkcyjnych takich jak –SH czy –OH nie jest brana pod uwagę.

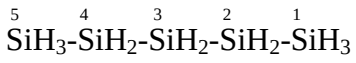
Przykłady:



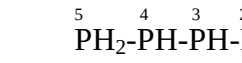
hydrazyna (nazwa zachowana, wstępnie wybrana, patrz P-12.2)
diazan



nonaazan (nazwa wstępnie wybrana, patrz P-12.2)



pentasilan (nazwa wstępnie wybrana, patrz P-12.2)



pentafosfan (nazwa wstępnie wybrana, patrz P-12.2)

tetrasulfan (wstępnie wybrana nazwa)
(nie disulfanoditiol ani trisulfanotiol, patrz P-58.3.1

P-21.2.3 Heterogeniczne acykliczne macierzyste wodorki. Wyróżnić można dwa typy:

P-21.2.3.1 Heterogeniczne wodorki macierzyste składające się z występujących na przemian atomów

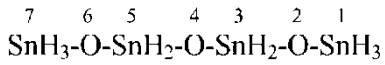
P-21.2.3.2 Heterogeniczne wodorki macierzyste nazywane w nomenklaturze zamiennej (‘a’) szkieletu

P-21.2.3.1 Heterogeniczne wodorki macierzyste składające się z występujących na przemian heteroatomów, to znaczy [a(ab)$_n$ wodorki] z wyłączeniem atomów węgla i halogenów.

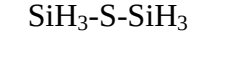
Związki zawierające nierozgałęziony łańcuch występujących na przemian atomów zakończony przez dwa identyczne atomy pierwiastka występującego później w porządku starszeństwa O > S > Se > Te > N > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al > Ga > In > Tl mogą być nazywane przez wymienienie kolejno: przedrostka zwielokrotniającego wskazującego liczbę atomów końcowego pierwiastka, następnie członu ‘a’ tego pierwiastka, a po nim członu ‘a’ drugiego pierwiastka w łańcuchu i końcówki ‘an’. Końcowa litera ‘a’ członu ‘a’ jest pomijana, jeśli po niej występuje samogłoska. Końcowa samogłoska przedrostka liczbowego nie jest pomijana nawet wówczas gdy człon ‘a’ zaczyna się od tej samej samogłoski. Gdy występują atomy azotu nazwy 'amina' (patrz P-62) są preferowane, ze względu na wyższą funkcjonalność amin. Nie dotyczy to innych pierwiastków. Takie wodorki macierzyste są wstępnie wybranymi wodorkami macierzystymi (patrz P-12.2) i jeśli służą do tworzenia nazw związków zawierających atomy węgla mają priorytet w otrzymywaniu preferowanych nazw IUPAC.

> Jest to zmiana w stosunku do Przewodnika z 1993 roku (ref. 2), w którym charakterystyczna grupa ‘amina’ nie była uznawana.

Przykłady:



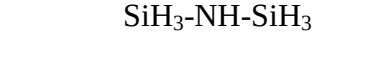
tetrastannoksan (wstępnie wybrana nazwa, patrz P-12.2)



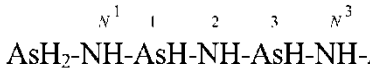
disilatian (wstępnie wybrana nazwa, patrz P-12.2)

ditioksan (wstępnie wybrana nazwa, patrz P-12.2)

difosfaselenan (nazwa wstępnie wybrana, patrz P-12.2)



N-sililosilanoamina (nazwa pochodząca od wstępnie wybranej nazwy ‘silan’, patrz P-12.2)
(nie disilazan)

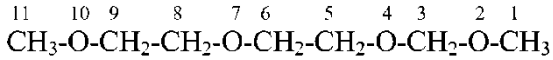


N^1,N^3-bis(arsanyl)diarsazano-1,3-diamina (nazwa pochodząca od wstępnie wybranego ‘diarsazan’ i wstępnie wybranego przedrostka arsanyl, patrz P-12.2)
(nie tetraarsazan)

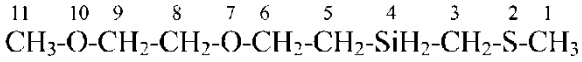
P-21.2.3.2 Heterogeniczne wodorki macierzyste utworzone w nomenklaturze zamiennej (‘a’) szkieletu

Heterogeniczne acykliczne macierzyste wodorki składające się z łańcuchów zawierających przynajmniej jeden atom węgla i różne lub takie same heteroatomy, i zakończonych atomami C, P, As, Sb, Bi, Si, Ge, Sn, Pb, B, Al., Ga, In i Tl nazywa się za pomocą nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu (patrz P-15.4,3). W rozdziale P-5 rozważane jest użycie nazw zamiany (‘a’) szkieletu jako preferowanych nazw IUPAC.

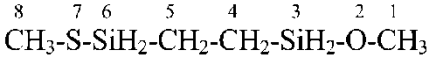
Przykłady:



2,4,10-tetraoksaundekan (PIN)



7,10-dioksa-2-tia-4-silaundekan (PIN)

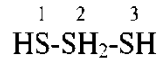


2-oksa-7-tia-3,6-disilaoktan (PIN)

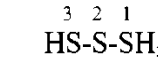
P-21.2.4 Acykliczne wodorki macierzyste zawierające heteroatomy o niestandardowych wiązalnościach

P-21.2.4.1 Heteroatomy o niestandardowej wiązalności oznacza się symbolem λ^n umieszczanym za każdym odpowiednim lokantem (patrz P-14.1). Niska numeracja przypisywana jest heteroatomom w zwykły sposób, bez wpływu ich niestandardowej wiązalności. Tam gdzie jest możliwość wyboru niższe lokanty przypisuje się wyższej niestandardowej wiązalności.

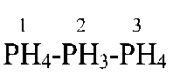
Przykłady:



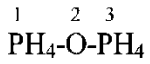
$2\lambda^4$-trisulfan (nazwa wstępnie wybrana, patrz P-12.2)



$1\lambda^6$-trisufan (nazwa wstępnie wybrana, patrz P-12.2)



$1\lambda^5,2\lambda^5,3\lambda^5$-trifosfan (nazwa wstępnie wybrana, patrz P-12.2) (nie tri- λ^5-fosfan)



$1\lambda^5,3\lambda^5$-difosfoksan (nazwa wstępnie wybrana, patrz P-12.2)

P-21.2.4.2 Kiedy konieczne jest dokonanie wyboru pomiędzy takimi samymi atomami szkieletu z co najmniej dwoma niestandardowymi wiązalnościami, niskie lokanty przypisuje się w porządku malejącej wiązalności, na przykład λ^6 otrzyma niższy lokant niż λ^4.

Przykłady:

$^{6}\,\,^{5}\,\,^{4}\,^{3}\,^{2}\,\,^{1}$
$SH\text{-}SH_2\text{-}S\text{-}S\text{-}SH_4\text{-}SH$

$2\lambda^6,5\lambda^4$-heksasulfan (nazwa wstępnie wybrana , patrz P-12.2)

$^{12}\,\,^{11}\,^{10}\,\,^{9}\,\,^{8}\,^{7}\,\,^{6}\,\,^{5}\,\,^{4}\,\,^{3}\,\,^{2}\,^{1}$
$CH_3\text{-}S\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}S\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}SH_2\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}S\text{-}CH_3$

$2,5\lambda^4,8,11$-tetratiadodekan (PIN)

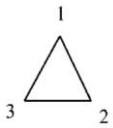
P-22 MONOCYKLICZNE WODORKI MACIERZYSTE

P-22.1 Monocykliczne węglowodory
P-22.2 Heteromonocykliczne macierzyste wodorki

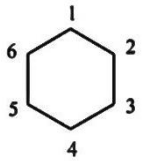
P-22.1 MONOCYKLICZNE WĘGLOWODORY

P-22.1.1 Nazwy nasyconych monocyklicznych węglowodorów tworzone są przez dodanie nierozłącznego przedrostka ‘cyklo’do nazwy acyklicznego, nasyconego, nierozgałęzionego węglowodoru o tej samej liczbie atomów węgla. Ogólną nazwą monocyklicznych węglowodorów jest ‘cykloalkan’. Numerowanie przebiega kolejno wokół pierścienia, zwykle zgodnie z ruchem wskazówki zegara. Nienasycone monocykliczne węglowodory omówione są w P-31.1.

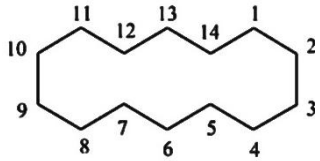
Przykłady:



cyklopropan (PIN)



cykloheksan (PIN)



cyklotetradekan (PIN)

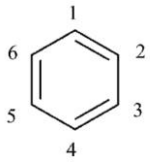
P-22.1.2 Niepodstawione monocykliczne węglowodorowe polieny z maksymalną liczbą nieskumulowanych wiązań podwójnych (mancude) o ogólnym wzorze C_nH_n albo C_nH_{n+1} (n większe niż 6) mają ogólną nazwę annuleny. Określony annulen jest nazywany jako [n]annulen, gdzie n, większe niż 6, jest liczbą atomów węgla w pierścieniu. Kiedy n jest liczbą nieparzystą, to znaczy gdy annulen ma ogólny wzór C_nH_{n+1}, dodatkowy atom wodoru określany jest jako ‘wskazany atom wodoru’ (patrz P-14.7) i przypisuje się mu lokant ‘1’. Takie nazwy annulenów mogą być używane w ogólnej nomenklaturze i są preferowanymi nazwami IUPAC macierzystych składników w nomenklaturze skondensowanej (patrz P-25.3.2.1.1); ale nie jako przedrostki składnika.

Preferowane nazwy IUPAC w pełni nienasyconych węglowodorów są tożsame z nazwami odpowiednich cykloalkapolienów (patrz P-31.1.3.1).

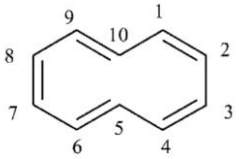
Benzen jest nazwą zachowaną dla C_6H_6; nazwa [6]annulen nie jest zalecana.

Przy numeracji annulenów z parzystą liczbą atomów węgla lokant ‘1’ umieszcza się przy dowolnym atomie węgla. W przypadku annulenów o nieparzystej liczbie atomów węgla lokant ‘1’ przypisuje się atomowi węgla połączonemu ze wskazanym atomem wodoru (patrz P-14.7). W strukturach cykloalkapolienów lokant ‘1’ przypisywany jest zawsze atomowi węgla podwójnego wiązania.

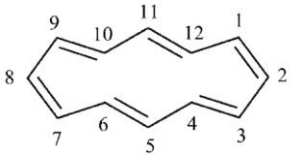
Przykłady:



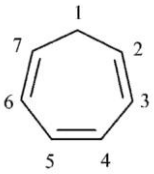
benzen (PIN; nazwa zachowana)
(nie [6]annulen]



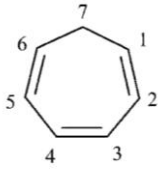
[10]annulen
cyklodeka-1,3,5,7,9-pentaen
(PIN, patrz P-25.3.2.1.1)



[12]annulen
cyklododeka-1,3,5,7,9,11-heksaen
(PIN), patrz P-31.1.3.1)



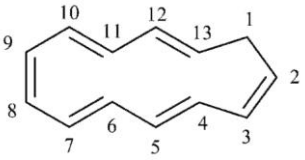
(I)



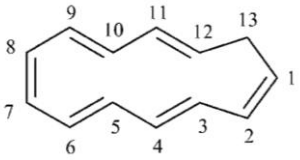
(II)

(I) 1*H*-[7]annulen

(II) cyklohepta-1,3,5-trien (PIN; patrz P-31.1.3.1)



(I)



(II)

(I) 1*H*-[13]annulen

(II) cyclotrideka-1,3,5,7,9,11-heksaen
(PIN, patrz P-31.1.3.1)

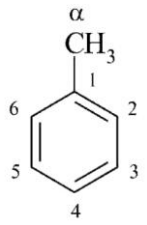
P-22.1.3 Macierzyste węglowodory o zachowanych nazwach

Toluen, ksylen i mezytylen są szczególnymi macierzystymi wodorkami utworzonymi z dwóch składników, jednego cyklicznego oraz drugiego acyklicznego i nasyconego. Ich nazwy zachowuje się ze względu na długą i mocno zakorzenioną tradycję. Toluen i ksylen są preferowanymi nazwami IUPAC, nie mogą być one jednak dowolnie podstawialne; toluen jest, pod

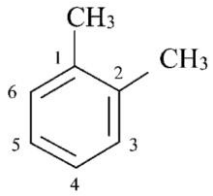
pewnymi warunkami, podstawialny, ale tylko w ogólnej nomenklaturze (patrz P-15.1.8 – ogólne reguły podstawienia zachowanych nazw).

Mezytylen jest nazwą zachowaną tylko w ogólnej nomenklaturze i nie może być podstawiony. Nazwy kumen i cymen nie są zachowane.

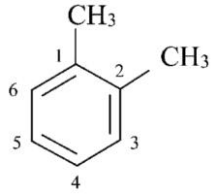
W Przewodniku z 1993 roku (ref. 2) nazwy tych macierzystych wodorków były zachowane, ale dopuszczalne było tylko ograniczone ich podstawienie



toluen (PIN)
(bez podstawienia; w ogólnej nomenklaturze podstawienie jest dozwolone ale tylko grupami wymienionymi w P-15.1.8.2.2)



ksylen (izomery 1,2-, 1,3 i 1,4, PINy)
(bez podstawienia)
o-, *m*-, i *p*-ksylen



mezytylen (bez podstawienia
1,3,5-trimetylobenzen (PIN)

P-22.2 HETEROMONOCYKLICZNE WODORKI MACIERZYSTE

P-22.2.1 Zachowane nazwy heteromonocykli
P-22.2.1 Heteromonocykliczne wodorki macierzyste z 3 – 10 członowymi pierścieniami (nazwy Hantzscha-Widmana)
P-22.2.3 Heteromonocykliczne wodorki macierzyste nazywane w nomenklaturze zamiennej (‘a’) szkieletu
P-22.2.4 Heteromonocykle jedenasto i więcej członowe z maksymalną liczbą nieskumulowanych podwójnych wiązań
P-22.2.5 Homogeniczne monocykliczne wodorki macierzyste inne niż wodorki boru
P-22.2.6 Heteromonocykliczne wodorki macierzyste złożone z powtarzających się heterojednostek
P-22.2.7 Heteromonocykliczne wodorki macierzyste z heteroatomami o niestandardowej wiązalności

P-22.2.1 Zachowane nazwy heteromonocykli

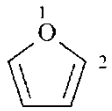
Zachowane nazwy heteromonocykli ‘mancude’ i ich chalkogenowych analogów przedstawia Tabela 2.2.

Uwaga: termin ‘mancude’ jest akronimem MAximum number of NonCUmulative DoublE bonds.

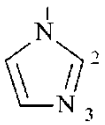
W celu utworzenia nazw analogów chalkogenowych nazwę ‘piran’ modyfikuje się według nomenklatury zamiennej funkcji.

W Tabeli 2.3 podane są zachowane nazwy nasyconych heteromonocykli.

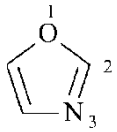
Tabela 2.2 Zachowane nazwy heteromonocyklicznych mancude wodorków macierzystych



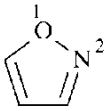
furan (PIN)



imidazol (pokazano izomer 1*H*; PINem jest 1*H*-imidazol



oksazol
1,3-oksazol (PIN)



izooksazol
1,2-oksazol (PIN)

tiazol (S zamiast O)
1,3-tiazol

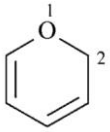
izotiazol (S zamiast O)
1,2-tiazol (PIN)

selenazol (Se zamiast O)
1,3-selenazol (PIN)

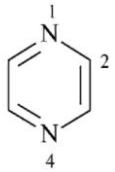
izoselenazol (Se zamiast O)
1,2-selenazol (PIN)

tellurazol (Te zamiast O)
1,3-tellurazol (PIN)

izotellurazol (Te zamiast O)
1,2-tellurazol (PIN)

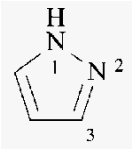


piran (pokazano izomer 2*H;* PINem jest 2*H*-piran)



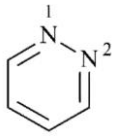
pirazyna (PIN)

tiopiran (S zamiast O)
(pokazano izomer 2*H*; PINem jest 2*H*-tiopiran)

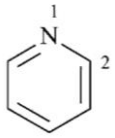


selenopiran (Se zamiast O) (pokazano izomer 2*H*; PINem jest 2*H*-selenopiran)
telluropiran (Te zamiast O) (pokazano izomer 2*H*; PINem jest 2*H*-telluropiran)

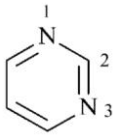
pirazol (pokazano izomer 1*H;* PINem jest 1*H*-pirazol)



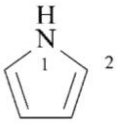
pirydazyna (PIN)



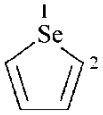
pirydyna (PIN)



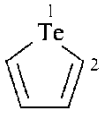
pirymidyna (PIN)



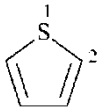
pirol (pokazano izomer1*H*; PINem jest 1*H*-pirol)



selenofen PIN)

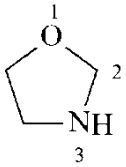


tellutofen (PIN)

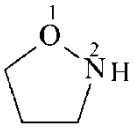


tiofen (PIN)

Tabela 2.3 Zachowane nazwy nasyconych heteromonocyklicznych wodorków macierzystych



oksazolidyna
1,3-oksazolidyna (PIN)



izoksalidyna
1,2-oksazolidyna (PIN)

tiazolidyna (S zamiast O)
1,3-tioksazolidyna (PIN)

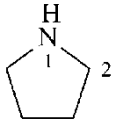
izotiazolidyna (S zamiast O)
1,2-tiazolidyna (PIN)

selenazolidyna (Se zamiast O)
1,3-selenazolidyna (PIN)

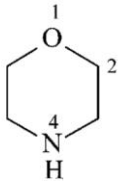
izoselenazolidyna (Se zamiast O)
1,2-selenazolidyna (PIN)

tellurazolidyna (Te zamiast O)
1,3-tellurazolidyna (PIN)

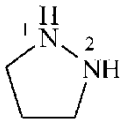
izotellurazolidyna (Te zamiast O)
1,2-tellurazolidyna (PIN)



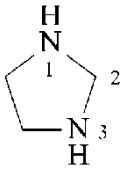
pirolidyna (PIN)



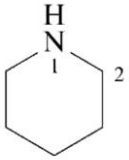
morfolina (PIN)
tiomorfolina (S zamiast O) (PIN)
selenomorfolina (Se zamiast O) (PIN)
telluromorfolina (Te zamiast O) (PIN)



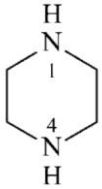
pirazolidyna (PIN)



imidazolidyna (PIN)



piperydyna (PIN)



piperazyna (PIN)

P-22.2.2 Heteromonocykliczne wodorki macierzyste z pierścieniami od 3 do 10 członowymi (nazwy Hantzscha-Widmana)

Heteromonocykliczne wodorki macierzyste o pierścieniach nie więcej niż 10 członowych i zawierających jeden lub więcej heteroatomów nazywane są przy użyciu rozszerzonego systemu Hantzscha-Widmana (ref. 1). Ponieważ jest on modyfikacją metody opublikowanej w zaleceniach z 1979 roku (ref. 1) nie ma potrzeby wprowadzania wielu wyjaśnień i komentarzy. Nazwy homogenicznych heteromonocyklicznych pierścieni są wstępnie wybrane (patrz P-12.2). Zalecenia z 1973 roku pozostają aktualne w CAS dla nazw pierścieni skondensowanych.

Pierwiastki glin, gal, ind i tal są obecnie włączone do zalecanego systemu Hantzscha-Widmana; natomiast rtęć została z niego usunięta

P-22.2.2.1 Tworzenie i numerowanie nazw Hantzscha-Widmana

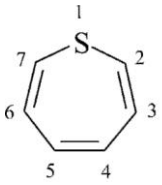
P-22.2.2.1.1 Nazwy Hantzscha-Widmana tworzy się przez łączenie przedrostka (lub przedrostków) zamiennych (‘a’) dla heteroatomu(ów) szkieletu (Tabela 2.4) z rdzeniem wskazującym wielkość pierścienia i stopień uwodornienia (Tabela 2.5). Końcową samogłoskę ‘a’ pomiędzy przedrostkami ‘a’ i pomiędzy przedrostkiem ‘a’ i rdzeniem usuwa się. Związkami nienasyconymi są związki mające maksymalną liczbę nieskumulowanych wiązań podwójnych (związki mancude) i co najmniej jedno podwójne wiązanie. Obecność pojedynczego heteroatomu

decyduje o numeracji w związku monocyklicznym. Heteroatom otrzymuje lokant 1 i w niepodstawionych pierścieniach numeracja biegnie zgodnie ze wskazówkami zegara.

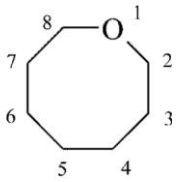
Nazwy Hantzscha-Widmana, z wyjątkiem azyna i oksyn, są preferowanymi nazwami IUPAC zarówno związków nasyconych jak i nienasyconych. Nazwa azyna nie może być użyta dla pirydyny ponieważ ma ona od dawna ustalone przeznaczenie jako nazwa klasy dla związków =N-N= (patrz P-68.3.1.2.3). Nazwa oksyn nie może być użyta dla piranu ponieważ była ona stosowany jako nazwa zwyczajowa chinolin-8-olu.

Nazwy Hantzscha-Widmana są wstępnie wybranymi nazwami homogenicznych heteromonocykli innych niż węglowodory (patrz P-22.2.5).

Przykłady:



tiepin (PIN)



oksokan (PIN)

Tabela 2.4 Przedrostki w systemie Hantzscha-Widmana (w malejącym porządku starszeństwa)

Pierwiastek	Wiązalność	Przedrostek (walencyjńść)	Pierwiastek	Wiązalność (walencyjność)	Przedrostek
fluor	1	fluora	bizmut	3	bizma
chlor	1	chlora	krzem	4	sila
brom	1	broma	german	**4**	germa
jod	1	joda	cyna	**4**	stanna
tlen	2	oksa	ołów	4	plumba
siarka	2	tia	bor	3	bora
selen	2	selena	glin	3	aluma[1] (nie alumina)
tellur	2	tellura	gal	3	gala
azot	3	aza	ind	3	indiga[1] (nie inda)
fosfor	3	fosfa	tal	3	tala
arsen	3	arsa	antymon	3	styba

[1]Porównaj z Tabelą 1.5

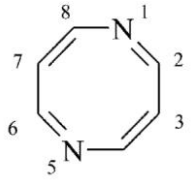
Tabela 2.5 Rdzenie nazw w systemie Hantzcha-Widmana

Wielkość pierścienia	Nienasycony	Nasycony	Wielkość pierścienia	Nienasycony	Nasycony
3	iren/iryna[1]	iran/irydyna[2]	7	epin	epan
4	et	etan/etydyna[2]	8	ocyn	okan
5	ol	olan/olidyna[2]	9	onin	onan
6A (O, S, Se,Te, Bi)	in	an	10	ecyn	ekan
6B (N, Si, Ge, Sn, Pb)	in	inan			
6C (F, Cl, Br, I, P, As, Sb, B, Al, Ga, In, Tl)	inin	inan			

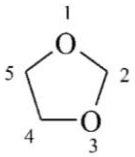
[1]Patrz P-22.2.2.1.5.1
[2]Patrz P-22.2.2.1.5.2

P-22.2.2.1.2 Wielokrotność tych samych heteroatomów wskazuje się za pomocą zwielokrotniających przedrostków ‘di’, ‘tri’, ‘tetra’, *etc.* umieszczanych przed odpowiednim członem ‘a’. Końcowa litera ‘a’ zwielokrotniającego przedrostka jest pomijana przed samogłoską. Na przykład tetrazol a nie tetraazol. Heteroatomom przypisuje się możliwie najniższe lokanty, a lokant ‘1’ otrzymuje jeden z heteroatomów. Lokanty wymienia się na początku nazwy, to znaczy przed członami ‘a’ zamiany szkieletu i poprzedzającymi przedrostkami liczbowymi.

Przykłady:



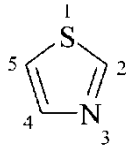
1,5-diazocyn (PIN)



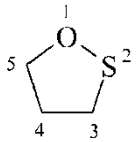
1,3-dioksolan (PIN

P-22.2.2.1.3 Jeśli dwa lub więcej rodzajów heteroatomów występuje w tej samej nazwie porządek ich wymieniania ma następującą kolejność: F, Cl, Br, I, O, S, Se, Te, N, P, As, Sb, Bi, Si, Ge, Sn, Pb, B, Al, In, Tl. Lokant ‘1’ otrzymuje heteroatom, który występuje jako pierwszy w kolejności starszeństwa stosowanej przy wymieniania członów ‘a’ zamiany szkieletu. Następnie prowadzi się numerowanie tak, aby heteroatomy, rozpatrywane jako zbiór w rosnącym porządku numerycznym, miały jak najniższe lokanty. Lokanty umieszcza się na początku nazwy w kolejności wymieniania członów ‘a’ zamiany szkieletu.

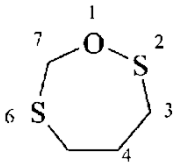
Przykłady:



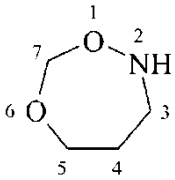
1,3-diazol (PIN)



1,2-oksatiolan (PIN)



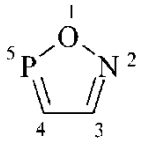
1,2,6-oksaditiepan (PIN)
(nie 1,3,7-oksaditiepan; zestaw lokantów ‘1,2,6’ jest niższy niż ‘1,3,7’)



1,6,2-dioksazaepan (PIN)
(nie 1,3,4- dioksazaepan, nie 1,3,7-dioksazaepan, nie 1,6,5-dioksazaepan; zestaw lokantów ‘1,6,2’ jest niższy niż ‘1,3,4’, ‘1,3,7’i ‘1,5,6’

Jeżeli nadal istnieje możliwość wyboru niższe lokanty przypisuje się heteroatomom w porządku w jakim występują w kolejności starszeństwa (patrz Tabela 2.4).

Przykład:

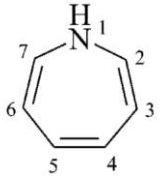


1,2,5-oksazafosfol (PIN)
(nie 1,5,2- oksazafosfol; N ma pierwszeństwo przed P do otrzymania niższego lokantu)

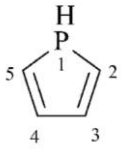
P-22.2.2.1.4 Wskazany atom wodoru

Po przypisaniu pierścieniowej strukturze maksymalnej liczby nieskumulowanych wiązań podwójnych, każdy atom pierścienia o wiązalności rzędu trzy lub wyższej, połączony z sąsiadującymi atomami pierścienia tylko pojedynczymi wiązaniami i niosący jeden lub więcej atomów wodoru jest oznaczony przez wskazany atom wodoru (patrz P-14.7). Jeżeli jest możliwość wyboru, takie atomy otrzymują niskie lokanty.

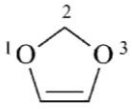
Przykład:



1*H*-azepin (PIN)



1*H*-fosfol (PIN)



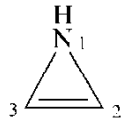
2*H*-1,3-dioksol (PIN)

P-22.2.2.1.5 Wybór nazw Hantzscha-Widmana dla 3-, 4- i 5-członowych pierścieni

Jak pokazano w Tabeli 2.5, ‘mancude’ trójczłonowe pierścienie i nasycone trój-, cztero- i pięcioczłonowe pierścienie nazywa się stosując dwa różne rdzenie. Przy tworzeniu preferowanej nazwy IUPAC są one używane w następujący sposób:

P-22.2.2.1.5.1 Rdzeń ‘iryna’ (‘yryna’) jest używany zamiast ‘iren’ dla pierścieni zawierających tylko heteroatomy azotu; w innych przypadkach jest stosowany rdzeń ‘iren’.

Przykłady:



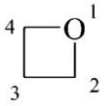
1*H*-azyryna (PIN)

oksiren (PIN)

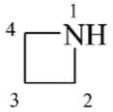
oksaziren (PIN)

P-22.2.2.1.5.2 Rdzenie ‘irydyna’, ‘etydyna’ i ‘olidyna’ używane są wtedy gdy w pierścieniu występuje atom azotu; w innych przypadkach używa się rdzenia ‘an’.

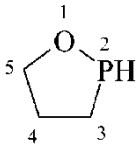
Przykłady:



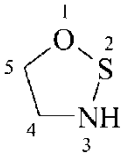
oksetan (PIN)



azetydyna (PIN)



1,2-oksafosfolan (PIN)

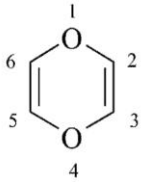


1,2,3-oksatiazolidyna (PIN)

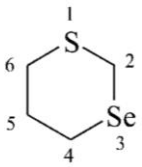
P-22.2.2.1.6 Wybór nazw Hantzscha-Widmana dla pierścieni sześcioczłonowych

Rdzeń nazwy pierścienia sześcioczłonowego zależy od heteroatomu o najniższym starszeństwie w pierścieniu, to znaczy od heteroatomu, który bezpośrednio poprzedza rdzeń. Heteroatomy podzielone są na trzy grupy: A, B i C, każda odpowiadająca rdzeniowi dla nienasyconych i dla nasyconych związków (Tabela 2.5). Rdzeń wybiera się zgodnie z grupą do której należy heteroatom o najniższym starszeństwie.

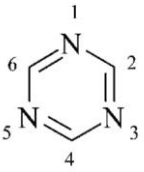
Przykłady:



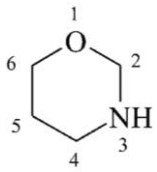
1,4-dioksyn (PIN)



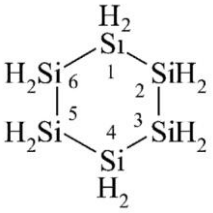
1,3-tiaselenan (PIN)



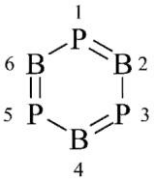
1,3,5-triazyna (PIN)



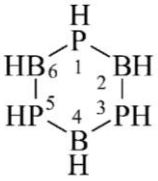
1,3-oksazynan (PIN)



heksasilinan (nazwa wstępnie wybrana; patrz P-12.2)



1,3,5,2,4,6-trifosfatriborinin (nazwa wstępnie wybrana; patrz P-12.2)



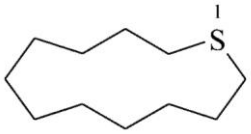
1,3,5,2,4,6-trifosfatriborinan (nazwa wstępnie wybrana; patrz P-12.2)

P-22.2.3 Wodorki heteromonocykliczne nazywane w nomenklaturze zamiennej (‘a’) szkieletu

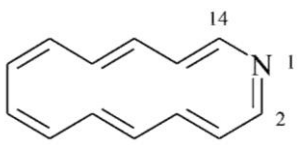
Związki heteromonocykliczne, ‘mancude’ oraz nasycone, z pierścieniami do i włącznie dziesięcioczłonowymi nazywane są zgodnie z rozszerzonym systemem Hantzscha-Widmana (patrz P-22.2.2) . Do pierścieni jedenasto- i więcej członowych stosuje się nomenklaturę zamienną (‘a’) szkieletu (patrz P-15.4) dla związków w pełni nasyconych jak i w pełni nienasyconych ([n]annuleny).

P-22.2.3.1 Nazwy zamiany (‘a’) szkieletu tworzy się umieszczając przedrostek zamiany (‘a’) szkieletu (patrz Tablica 2.4) przed nazwą odpowiedniego cykloalkanu lub annulenu. Kiedy pierścień zawiera więcej niż jeden heteroatom, wskazuje się je w następującym malejącym porządku starszeństwa: F > Cl > Br > I > O > S > Se > Te > N > P > As >Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al. > Ga > In > Tl. Numeracja opisana jest w P-22.2.3.2. Wybór preferowanej nazwy IUPAC omówiony jest w P-52.2.3.

Przykłady:



tiacyklododekan (PIN)

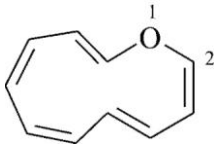


1-azacyklotetradeka-1,3,5,7,8,11,13-heptaen (PIN)
aza[14]annulen

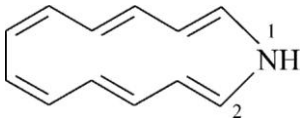
P-22.2.3.2 Numerowanie

P-22.2.3.2.1 Kiedy w pierścieniu obecny jest pojedynczy heteroatom, przypisuje się mu lokant '1', który pomija się jeśli nie występuje lokant wskazanego atomu wodoru. Gdy nie ma podstawników numeracja biegnie zwykle zgodnie z ruchem wskazówek zegara. Niskie lokanty w pierwszej kolejności przypisuje się heteroatomom, a następnie miejscom nienasycenia. (patrz P-31.1.3.2). W miarę potrzeby lokanty wskazanego atomu wodoru wyznaczane są zgodnie z P-14.7.

Przykłady:



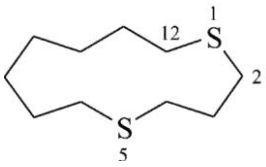
1-oksacykloundeka-2,4,6,8,10-pentaen (PIN)
oksa[11]annulen



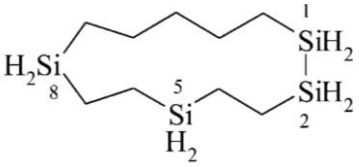
1-azacyklotrideka-2,4,6,8,10,12-heksen PIN)
1*H*-1-aza[13]annulen

P-22.2.3.2.2 Kiedy pierścień zawiera więcej niż jeden taki sam heteroatom wybiera się taki kierunek numeracji, aby nadać niższe lokanty heteroatomom jako zbiorowi.

Przykłady:



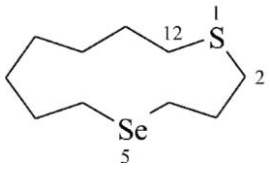
1,5-ditiacyklododekan (PIN)
(nie 1,9- ditiacyklododekan)



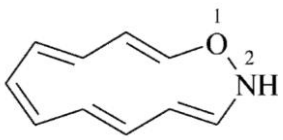
1,2,5,8-tetrasilacyklotridekan (PIN)
(inne zbiory lokantów to: '1,2,8,11', '1,4,7,8', '1,4,5,11', i '1,4,10,11', żaden z nich nie jest niższy niż '1,2,5,8'.

P-22.2.3.2.3 Kiedy w pierścieniu występują heteroatomy różnego rodzaju, lokant '1' nadaje się heteroatomowi pierwszemu wymienionemu w podanym powyżej porządku starszeństwa (patrz P-22.2.3.1). Wybiera się taki kierunek numeracji aby heteroatomom jako zbiorowi, bez względu na ich rodzaj, przypisać niższe lokanty, a wówczas, jeśli jest to konieczne, zgodnie z podanym powyżej porządkiem starszeństwa (patrz P-22.2.3.1). Niskie lokanty przypisuje się heteroatomom, a następnie miejscom nienasycenia (patrz P-31.1.3.2). Jeśli to potrzebne, wskazanym atomom wodoru nadaje się lokanty zgodnie z P-14.7.

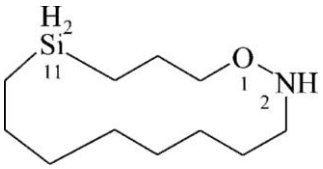
Przykłady:



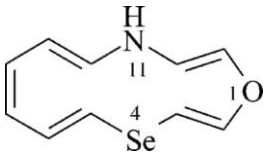
1-tia-5-selenacyklododekan (PIN)



1-oksa-2-azacyklododeka-3,5,7,9,11-pentaen (PIN)
2*H*-1-oksa-2-aza[12]annulen



1-oksa-2-aza-11-silacyklotetradekan
(PIN)



1-oksa-4-selena-11-azacyklotrideka-2,5,7,9,12-pentaen
(PIN)
11*H*-1-oksa-4-selena-11-aza-[13]annulen

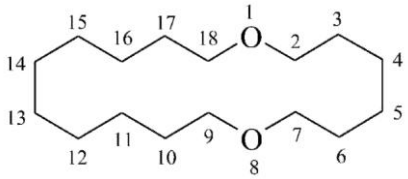
P-22.2.4 Heteromonocykle jedenasto- i więcej członowe z maksymalną liczbą nieskumulowanych wiązań podwójnych

W tej podsekcji dyskutowane są nazwy heteromonocyklicznych składników macierzystych z większymi niż dziesięcioczłonowe pierścieniami. Są one używane do tworzenia preferowanych nazw IUPAC układów skondensowanych pierścieni. Były także używane jako nazwy heteromonocykli w ogólnej nomenklaturze jako alternatywa dla nazw cykloalkapolienowych, które są preferowanymi nazwami dla heteromonocykli.

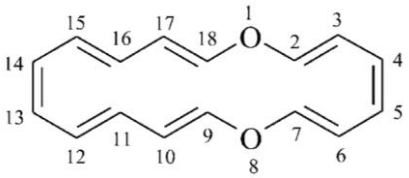
Heteromonocykliczny składnik macierzysty o pierścieniu większym niż dziesięcioczłonowy i z maksymalną liczbę nieskumulowanych wiązań podwójnych (mancude) nazywany jest przez zamianę końcówki ‘an’ w nazwie odpowiadającego mu nasyconego heteromonocyklu (patrz P-22.2.3) na ‘in/yn’. Lokanty wymienia się przed nazwą w porządku wymieniania odpowiednich przedrostków zamiany (‘a’) szkieletu. W miarę potrzeby podaje się lokanty wskazanych atomów wodoru. W nomenklaturze związków metaloorganicznych dla mniejszych pierścieni dopuszczona jest nomenklatura zamienna (‘a’) szkieletu aby umożliwić tworzenie nazw metalocyklicznych wodorków macierzystych (patrz P-69.4).

Przykłady związków skondensowanych zawierających tego typu heteromonocykliczne składniki pokazane są w P-25.2.2.4, P-25.3.6.1 i P-25.3.7.1.

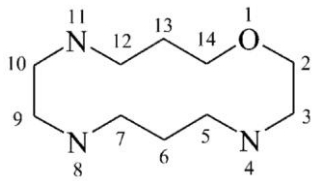
Przykłady:



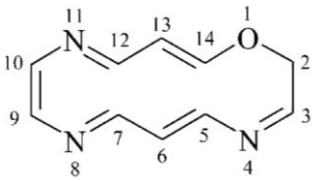
1,8-dioksacyklooktadekan
(PIN)



1,8-dioksacyklooktadecyn
1,8-dioksacyklooktadeka-2,4,6,9,11,13,15,17-oktaen
(PIN)



1-oksa-4,8,11-triazacyklotetradekan
(PIN)

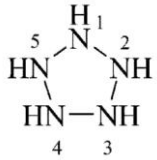


2*H*-1,4,8,11-oksatriazacyklotetradecyn
1-oksa-4,8,11-triazacyklotetradeka-3,5,7,9,11,13-heksaen
(PIN)

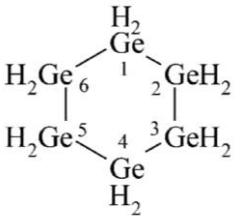
P-22.2.5 Homogeniczne heteromonocykliczne wodorki macierzyste inne niż wodorki boru.

Nasycone heteromonocykle składające się z identycznych heteroatomów można nazywać dodając przedrostek ‘cyklo’do nazwy nasyconego nierozgałęzionego łańcucha z tą samą liczbą identycznych atomów. Alternatywne metody podaje poszerzony system Hantzscha-Widmana opisany w P-22.2.3 dla pierścieni od trzech- do dziesięcioczłonowych i nomenklatura zamienna (‘a’) szkieletu opisana w P-22.2.3. Nazwy wstępnie wybrane (patrz P-12.2) ale używane do tworzenia preferowanych nazw IUPAC pochodnych organicznych omówione są w P-52.1.5.

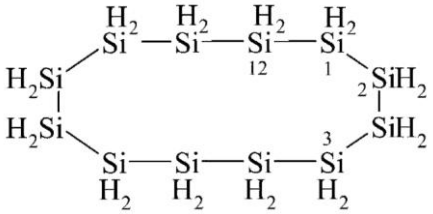
Przykłady:



cyklopentaazan
pentazolidyna
(nazwa wstępnie wybrana, patrz P-22.2.2.1.5)
pentazolan



cykloheksagerman
heksagerminan (nazwa wstępnie wybrana, patrz P-12.2)



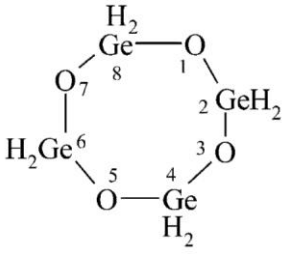
cyklododekasilan
dodekasilacyklodekan
(nazwa wstępnie wybrana, patrz P-12.2)

P-22.2.6 Heteromonocykliczne wodorki macierzyste utworzone z powtarzających się jednostek [wodorki cykliczne (ab_n)]

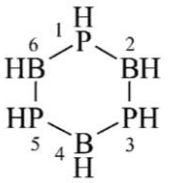
Nazwy mogą być tworzone przez wymienianie kolejno: przedrostka ‘cyklo’, zwielokrotniających afiksów (‘di’, ‘tri’, ‘tetra’, etc.) wskazujących liczbę atomów każdego z pierwiastków w pierścieniu, członów zamiennych (‘a’) atomów powtarzającej się jednostki, przy czym pierwszeństwo wymieniania jest w porządku Tl > In > Ga > Al > Pb > Sn > Ge > Si > Bi > Sb > As > P > N > Te > Se > S > O i końcówka ‘an’. Końcową literę członu zamiennego (‘a’) szkieletu, jeśli po niej występuje samogłoska, pomija się. Końcowej litery afiksu zwielokrotniającego nie pomija się nawet wtedy, kiedy człon ‘a’ zaczyna się od samogłoski. Numerowanie zaczyna się od jednego z atomów szkieletu pierwiastka wymienianego w nazwie jako ostatni i przebiega wokół pierścienia. W kwestii alternatywnych metod patrz P-22.2.2 - nazwy Hantzscha-Widmana i P-22.2.3 – monocykle o pierścieniach więcej niż dziesięcioczłonowych.

Nazwy wstępnie wybrane (patrz P-12.2) używane do tworzenia preferowanych nazw IUPAC dla organicznych pochodnych tych heteromonocyklicznych wodorków omówiono w P-52.1.7.

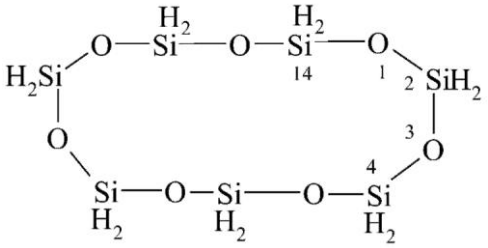
Przykłady:



cyklotetragermoksan
1,3,5,7,2,4,6,8-tetroksatetragermokan
(nazwa wstępnie wybrana, patrz P-12.2)



cyklotriborafosfan
3,5,2,4,6-trifosfatriborinan
(nazwa wstępnie wybrana,
patrz P-12.2)

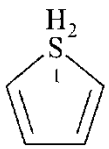


cykloheptasiloksan
1,3,5,7,9,11,13-heptaoksa-2,4,6,8,10,12,14-heptasilacyklotetradekan
(nazwa wstępnie wybrana, patrz P-12.2).

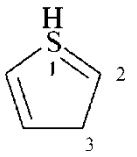
P-22.2.7 Heteromonocykliczne wodorki z heteroatomami o niestandardowej wiązalności

P-22.2.7.1 W heteromonocyklach do zaznaczenia heteroatomów o niestandardowej wiązalności używa się konwencji λ (patrz P-14.1). Symbol λ^n, w którym n oznacza wiązalność, umieszcza się bezpośrednio za lokantem wskazującym heteroatom o niestandardowej wiązalności. Symbol *H* wskazanego atomu wodoru, wymagany do oznaczenia nasyconych atomów szkieletu, wymienia się z odpowiednim lokantem na początku pełnej nazwy.

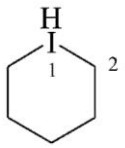
Przykłady:



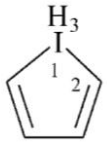
1*H*-1λ^4-tiofen (PIN)



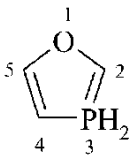
3*H*-1λ^4-tiofen (PIN)



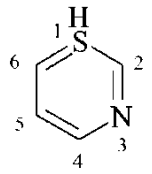
1λ^3-jodynan (PIN)



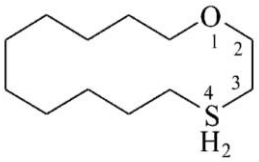
1*H*-1λ^5-jodol (PIN)



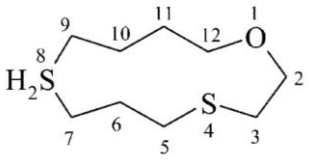
1,3λ^5-oksafosfol (PIN)



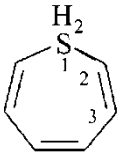
1λ^4,3-tiazyna (PIN)



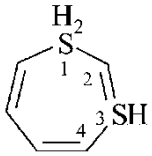
1-oksa-4λ^4-tiacyklotetradekan (PIN)



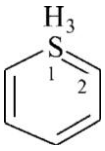
1-oksa-4,8λ^4-ditiacyklododekan (PIN)



1*H*-1λ^4-tiepin (PIN)



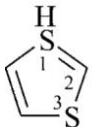
1*H*-1λ^4,3λ^4-ditiepin (PIN)
[grupie (-SH_2-) zawierającej wskazany atom wodoru przysługuje niższy lokant]



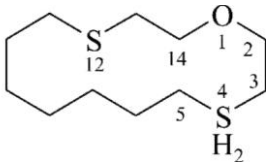
1λ^6-tiopiran (PIN)
(ten heteromonocykl ma maksymalną liczbę nieskumulowanych wiązań podwójnych i podwójne wiązanie w każdej pozycji dlatego dla atomu siarki nie podaje się wskazanego atomu wodoru)

P-22.2.7.2 Jeśli potrzebny jest nadal wybór pomiędzy dwoma lub większą liczbą takich samych atomów szkieletu o różnych wiązalnościach, niższy lokant przypisuje się w porządku malejącej wiązalności, to znaczy λ^6 jest wybierane przed λ^4 (patrz także P-21.2.4).

Przykłady:



$1\lambda^4$,3-ditiol (PIN)



1-oksa-$4\lambda^4$,12-ditiacyklotetradekan (PIN)

P-23 POLIALICYKLICZNE WODORKI MACIERZYSTE (Rozszerzony system von Baeyera)

P-23.0 Wprowadzenie
P-23.1 Definicje i terminologia
P-23.2 Nazywanie i numeracja węglowodorów von Baeyera
P-23.3 Heterogeniczne heterocykliczne wodorki macierzyste von Baeyera
P-23.4 Homogeniczne heterocykliczne wodorki macierzyste von Baeyera
P-23.5 Heterogeniczne heterocykliczne wodorki macierzyste von Baeyera utworzone z na przemian występujących heteroatomów
P-23.6 Heterocykliczne polialicykliczne wodorki macierzyste z heteroatomami o niestandardowej wiązalności
P-23.7 Zachowane nazwy wodorków macierzystych von Baeyera

P-23.0 WPROWADZENIE

Podrozdział ten opiera się na niedawnej publikacji „Rozszerzenie i przegląd systemu von Baeyera nazywania związków policyklicznych (włączając związki bicykliczne) (IUPAC, Zalecenia 1999)" (ref. 7). Zastępuje Reguły A-31, A-32 i B-13 w Zaleceniach z 1979 roku (ref. 1) i Regułę R-2.4.2 z Zaleceń z 1993 roku (ref. 2). W podrozdziale tym nie wprowadzono modyfikacji do publikacji z 1999 roku.

Zajęto się w nim tylko nasyconymi polialicyklicznymi układami pierścieni nazywanymi systemem von Baeyera; nienasycone układy patrz podrozdział P-11.1.4. Nazywanie podstawników wywodzących się z nasyconych polialicyklicznych układów pierścieni omówiono w podrozdziale P-29.

P-23.1.1 DEFINICJE I TERMINOLOGIA

P-23.1.1 'Przyczółek': każdy atom szkieletu układu pierścieni, który jest połączony z trzema lub więcej atomami szkieletu (wyłączając atomy wodoru).

P-23.1.2 'Mostek' to nierozgałęziony łańcuch atomów albo atom bądź wiązanie walencyjne łączące dwa przyczółki.

P-23.1.3 ‘Główny pierścień’ jest układem pierścieni, który zawiera możliwie największą liczbę atomów szkieletu układu policyklicznego.

P-23.1.4 ‘Główny mostek’ jest mostkiem włączonym do układu bicyklicznego i pierwszym wybranym mostkiem w układzie policyklicznym.

P-23.1.5 Dwa przyczółki wybrane jako ‘główne przyczółki’. Te dwa przyczółki zawarte są w głównym pierścieniu i połączone głównym mostkiem.

P-23.1.6 ‘Drugorzędny mostek’: każdy mostek nie należący do głównego pierścienia albo głównego mostka.

P-23.1.7 ‘Niezależny drugorzędny mostek’ łączy przyczółki, które są częścią głównego pierścienia albo głównego mostka.

P-23.1.8 ‘Zależny drugorzędny mostek’ łączy co najmniej jeden przyczółek, który jest częścią drugorzędnego mostka.

P-23.1.9 ‘Układ policykliczny’ zawiera liczbę pierścieni równą minimalnej liczbie przecięć potrzebnych do jego przemiany w acykliczny szkielet. Liczbę pierścieni wskazuje się nierozłącznym przedrostkiem ‘bicyklo’ (nie dicyklo), ‘tricyklo’, ‘tetracyklo’, etc.

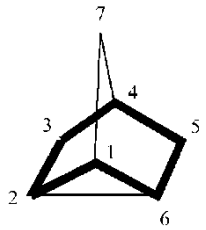
P-23.2 NAZYWANIE I NUMEROWANIE WĘGLOWODORÓW VON BAEYERA

Nazywanie węglowodorów w systemie von Baeyera polega na kolejnym zastosowaniu poniższych reguł aż do osiągnięcia rozstrzygnięcia.

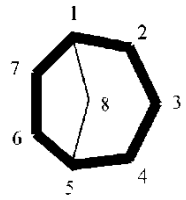
P-23.2.1 Wybór głównego pierścienia
P-23.2.2 Nazwanie bicyklicznych alicyklicznych węglowodorów
P-23.2.3 Numeracja bicyklicznych alicyklicznych węglowodorów
P-23.2.4 Wybór głównego mostka
P-23.2.5 Nazwanie i numeracja tricyklicznych alicyklicznych węglowodorów
P-23.2.6 Nazywanie i numeracja polialicyklicznych węglowodorów

P-23.2.1 Główny pierścień policyklicznego układu pierścieni węglowodoru wybiera się tak, aby obejmował możliwie największą liczbę atomów szkieletu. W podrozdziałach od P-23.2.1 do P-23.2.6 główny pierścień pokazany jest za pomocą wytłuszczonych linii.

Przykłady:



główny pierścień sześcioczłonowy



główny pierścień siedmioczłonowy

P-22.2.2 Nazywanie bicyklicznych alicyklicznych węglowodorów

Nasycone homogeniczne bicykliczne węglowodory posiadające dwa lub więcej wspólnych atomów nazywa się przez dodanie przedrostka 'bicyklo' do nazwy acyklicznego węglowodoru o tej samej całkowitej liczbie atomów szkieletu. Liczby atomów szkieletu w każdym z dwóch segmentów łączących główne przyczółki i w głównym łańcuchu podaje się za pomocą liczb arabskich wymienianych w zmniejszającym się liczbowo porządku, oddzielanych kropkami i zamkniętych w kwadratowych nawiasach.

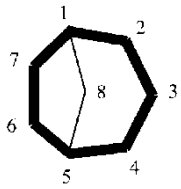
Przykład:

bicyklo[3.2.1]oktan (PIN)

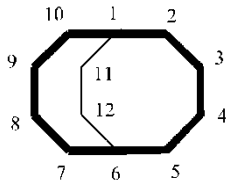
P-23.2.3 Numerowanie bicyklicznych węglowodorów alicyklicznych

Numerowanie bicyklicznego układu pierścieni zaczyna się od jednego przyczółka postępując najpierw wzdłuż dłuższego segmentu głównego pierścienia do drugiego przyczółka a następnie z powrotem, wzdłuż nienumerowanego segmentu głównego pierścienia, do pierwszego przyczółka. Numerowanie uzupełnia się numeracją głównego mostka zaczynającą się od atomu sąsiadującego z pierwszym przyczółkiem.

Przykłady:



bicyklo[3.2.1]oktan (PIN)

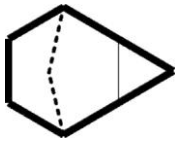


bicyklo[4.4.2]dodekan (PIS)

P-23.2.4 Wybór głównego mostka

Policykliczne układy pierścieni zawierają więcej niż jeden mostek łączący atomy głównego pierścienia i/albo głównego mostka. Poniżej, w tricyklicznym pierścieniu, główny pierścień jest pokazany nieprzerywanymi, wytłuszczonymi liniami, a główny mostek pokazany liniami przerywanymi, jest tym mostkiem, który zawiera możliwie największą liczbę atomów nie należących do głównego pierścienia. Mostki inne niż główny mostek nazywane ‘drugorzędnymi mostkami’ pokazane są poniżej normalnymi nieprzerywanymi liniami.

Przykład:



P-23.2.5 Nazywanie i numerowanie tricyklicznych węglowodorów alicyklicznych

P-23.2.5.1 Tricykliczne węglowodory mające niezależny drugorzędny mostek nazywa się na podstawie układu bicyklicznego opisanego w P-23.2.2. Pierścienie nie opisane w układzie bicyklicznym określa się podając liczbę atomów w niezależnym drugorzędnym mostku jako liczbę arabską. Lokanty dwóch punktów przyłączenia niezależnego drugorzędnego mostka do głównego pierścienia wymienia się w indeksie górnym jako parę arabskich liczb (niższa liczba jest wymieniana pierwsza) oddzielonych przecinkiem.

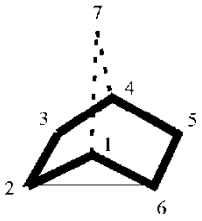
Nazwa tricyklicznego układu jest zatem tworzona przez wymienienie:

(a) przedrostka ‘tricyklo’ zamiast ‘bicyklo’, wskazującego obecność trzech pierścieni w układzie policyklicznym;

(b) liczb wskazujących długość mostków, zaczynając od dwóch gałęzi głównego pierścienia (pokazanych wytłuszczonymi liniami w strukturach poniżej), następnie głównego mostka (pokazanego przerywanymi liniami w strukturach poniżej) i drugorzędnego mostka (z indeksem górnym lokantów oddzielonych przecinkiem wskazujących miejsca przyłączenia do głównego pierścienia). Wszystkie liczby oddziela się kropkami i umieszcza w nawiasach kwadratowych. Na przykład [2.2.1.$0^{2,6}$];

(c) nazwę acyklicznego węglowodoru o tej samej całkowitej liczbie atomów szkieletu.

Przykład:

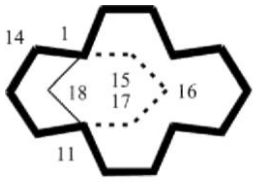


tricyklo[2.2.1.$0^{2,6}$]heptan (PIN)

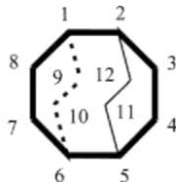
P-23.2.5.2 Numerowanie drugorzędnego mostka

Po zakończeniu numeracji głównego pierścienia i głównego mostka numeruje się niezależny drugorzędny mostek zaczynając od przyczółka głównego pierścienia o wyższym numerze.

Przykłady:



tricyklo[9.3.3.$1^{1,11}$]oktadekan (PIN)



tricyklo[4.2.2.$2^{2,5}$]dodekan (PIN)
[drugorzędny mostek jest numerowany zaczynając od mostka 5 o wyższym (niż 2) numerze.

P-23.2.6 Nazywanie i numerowanie policyklicznych alicyklicznych węglowodorów

W następnych podrozdziałach opisana jest nomenklatura policyklicznych analogów nasyconych bi- i tricyklicznych układów pierścieni (patrz P23.2.3 i P-23.2.5). Bierze się tu pod uwagę niezależne i zależne drugorzędne mostki. Opisane są reguły numeracji wszystkich drugorzędnych mostków i nazywania wszystkich polialicyklicznych układów. Ich zastosowanie naśladuje sposoby nazewnictwa i numeracji układów bicyklicznych przedstawione w podrozdziałach od P-23.2.1 do P-23.2.4. Konieczna jest dodatkowa reguła do wyboru głównego mostka i mostków drugorzędnych.

P-23.2.6.1 Nazywanie policyklicznych węglowodorów alicyklicznych

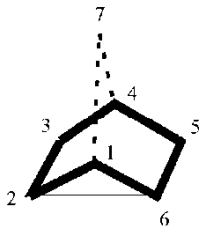
Nazwy pierścieni, które nie odpowiadają opisanemu poprzednio (patrz 23.2.2) układowi bicyklicznemu tworzy się wymieniając cyframi arabskimi liczbę atomów w każdym drugorzędnym mostku. Lokanty dwóch punktów przyłączenia każdego z drugorzędnych mostków do głównego pierścienia podaje się w indeksie górnym jako parę liczb arabskich (najpierw niższy) oddzielonych przecinkiem. Liczby wskazujące niezależne drugorzędne mostki (mostki łączące atomy układu bicyklicznego) wymienia się w malejącym porządku. W następujących podrozdziałach omówiona jest procedura tworzenia nazw.

P-23.2.6.1.1 Przedrostki ‘tricyklo’, ‘tetracyklo’, *etc*. zamiast ‘bicyklo’ wskazują liczbę pierścieni układu polialicyklicznego. Liczba pierścieni jest równa liczbie przecięć wiązań koniecznych do przekształcenia układu policyklicznego w nierozgałęziony bądź rozgałęziony acykliczny szkielet.

P-23.2.6.1.2 Liczbę atomów w każdym mostku poza głównym mostkiem, to znaczy w drugorzędnych mostkach, wskazuje się cyframi arabskimi oddzielonymi kropkami i wymienianymi w malejącym liczbowo porządku po cyfrach opisujących układ bicykliczny, z wyjątkiem podanym w P-23.2.6.1.3. Lokalizację każdego drugorzędnego mostka wskazują lokanty arabskie ponumerowanego już układu bicyklicznego. Lokanty te wymienia się w indeksie górnym liczb arabskich wskazujących jego długość (liczbę atomów) i są przedzielone przecinkiem. Zespół cyfr arabskich określających długość mostków, z cyframi w indeksach górnych, jeśli są potrzebne, zwykle nazywany ‘deskryptorem von Baeyera’, zamyka się w kwadratowym nawiasie.

P-23.2.6.1.3 Niezależne mostki drugorzędne wymienia się przed zależnymi mostkami drugorzędnymi. Liczby wskazujące zależne mostki drugorzędne wymienia się w malejącym porządku (trzeci przykład w P-23.2.6.3 ilustruje ten porządek wymieniania).

P-23.2.6.1.4 Nazwę kończy nazwa alkanu reprezentującego całkowitą liczbę atomów pierścienia. Liczba ta odpowiada sumie liczb arabskich w liczbowym deskryptorze umieszczonym w kwadratowym nawiasie plus dwa (dwa atomy głównego przyczółka). Na przykład, w nazwie ‘bicyklo[2.2.1.$0^{2,6}$]heptan’ utworzonej dla poniższej struktury całkowita liczba atomów 7 równa się sumie podstawowych liczb w deskryptorze [2+2+1+0] + 2.



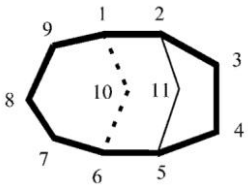
P-23.2.6.2 Wybór głównego mostka i mostków drugorzędnych

Często mamy szereg możliwości wyboru głównego mostka i mostków drugorzędnych. Aby dokonać właściwego wyboru stosuje się kolejno podane niżeje kryteria do momentu kiedy możliwe jest podjęcie decyzji.

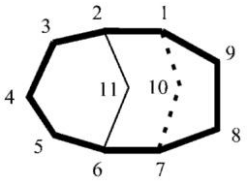
Uwaga: Numerację pokazaną w poniższych przykładach stosuje się do reguł podanych w P-23.2.6.3.

P-23.2.6.2.1 Główny pierścień powinien być podzielony w miarę możliwości symetrycznie przez główny mostek, który, jak wskazano w P-23.2.4, zawiera możliwie największą liczbę atomów nie objętych głównym pierścieniem.

Przykład:



nie



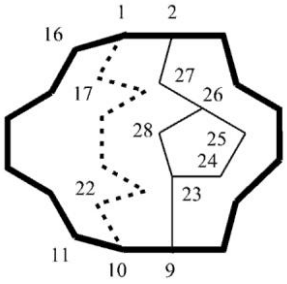
tricyklo[4.3.1.1^{2,5}]undekan (PIN)
poprawnie

tricyklo[5.2.1.1$^{2.6}$]undekan
niepoprawnie

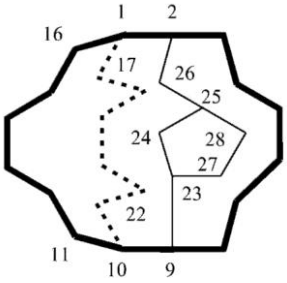
Wyjaśnienie: Dwa mostki 4 i 3 atomowe dzielą główny pierścień bardziej symetrycznie niż dwa mostki 5 i 2 atomowe.

P-23.2.6.2.2 Jeżeli istnieje wybór między niezależnymi drugorzędnymi mostkami, pierwszy wymieniany musi być możliwie długi. Następnie, jeśli ma to znaczenie, kolejny musi być również możliwie długi, etc.

Przykład:



nie



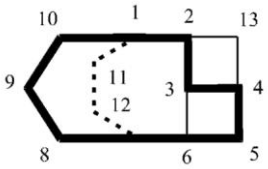
tetracyklo[8.6.6.5^{2,9}.1^{23,26}]oktakozan (PIN)
poprawnie

tetracyklo[8.6.6.4^{5,9}.2^{23,25}]oktakozan
niepoprawnie

Wyjaśnienie: Pięcioatomowy niezależny mostek pomiędzy pozycjami 2 i 9 głównego pierścienia jest dłuższy niż czteroatomowy niezależny mostek między pozycjami 2 i 9.

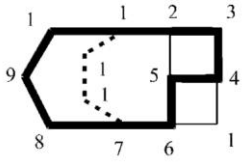
P-23.2.6.2.3 Liczba zależnych drugorzędnych mostków powinna być możliwie najmniejsza.

Przykład:



tetracyklo[5.3.2.1^{2,4}.0^{3,6}]tridekan (PIN)
poprawnie

nie

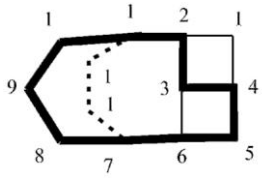


tetracyklo[5.3.2.1^{2,4}.0^{6,13}]tridekan
niepoprawnie

Wyjaśnienie: Poprawna struktura zawiera dwa zależne mostki; a niepoprawna struktura ma jeden zależny mostek pomiędzy pozycjami 6 i 13.

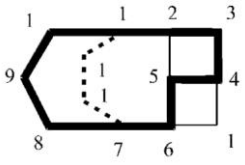
P-23.2.6.2.4 Lokanty w indeksie górnym dla drugorzędnych mostków, rozpatrywane jako zestaw w malejącym liczbowym porządku, powinny być możliwie niskie a decyzję podejmuje się w pierwszym punkcje różnicy.

Przykłady:



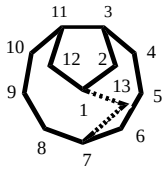
tetracyklo[5.3.2.1^{2,4}.0^{3,6}]tridekan (PIN)
poprawnie

nie



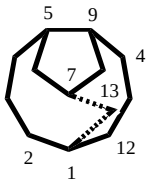
tetracyklo[5.3.2.1^{4,6}.0^{2,5}]tridekan
niepoprawnie

Wyjaśnienie: Zestaw lokantów ‘2,3,4,6’ jest niższy od ‘2,4,5,6’; patrz P-14.3.5



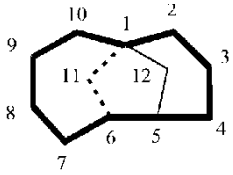
tricyklo[5.5.1.0^{3,11}]tridekan (PIN)
poprawnie

nie



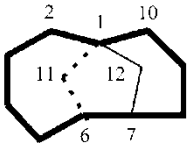
tricyklo[5.5.1.0^{5,9}]tridekan
niepoprawnie

Wyjaśnienie: Zestaw lokantów ‘3,11’ jest niższy od ‘5,9’; patrz P-14.3.5



tricyklo[4.4.1.1^{1,5}]dodekan (PIN)
poprawnie

nie

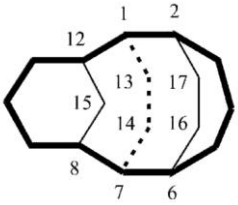


tricyklo[4.4.1.1^{1,7}]dodekan
niepoprawnie

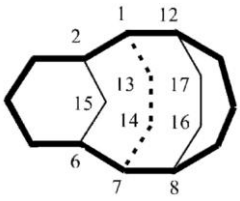
Wyjaśnienie: Zestaw lokantów ‘1,5’ jest niższy od ‘1,7’; patrz P-14.3.5

P-23.2.6.2.5 Lokanty w indeksie górnym rozważane w sekwencji porządku wymieniania w nazwie powinny być możliwie najniższe.

Przykłady:



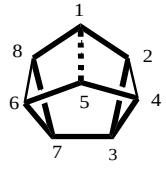
nie



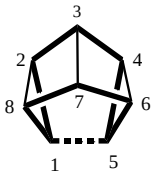
tetracyklo[5.5.2.2^{2,6}.1^{8,12}]heptadekan (PIN)
poprawnie

tetracyklo[5.5.2.2^{8,12}.1^{2,6}]heptadekan
niepoprawnie

Wyjaśnienie: Sekwencja lokantów ‘2,6,8,12’ jest niższa od ‘8,12,2,6’; patrz P_14.3.5



nie



pentacyklo[3.3.0.0^{2,4}.0^{3,7}.0^{6,8}]oktan (PIN)
poprawnie

pentacyklo[3.3.0.0^{2,8}.0^{3,7}.0^{4,6}]oktan
niepoprawnie

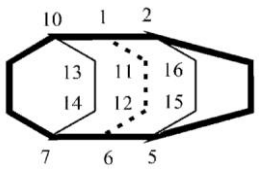
Wyjaśnienie: Sekwencja lokantów ‘2.4.3.7.6.8’ jest niższa od ‘2.8.3.7.4.6’; patrz P-14.3.5

P-23.2.6.3 Numerowanie drugorzędnych mostków

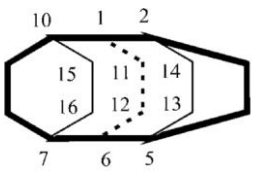
Po numeracji głównego pierścienia i głównego mostka numeruje się niezależne drugorzędne mostki, przed zależnymi mostkami drugorzędnymi. Numeracja biegnie od najwyżej numerowanego atomu głównego pierścienia i głównego mostka. Każdy drugorzędny mostek jest numerowany kolejno zaczynając od niezależnego drugorzędnego mostka połączonego z atomem przyczółka głównego mostka o najwyższym numerze. Kolejno niezależny drugorzędny mostek połączony z następnym najwyższym atomem i tak dalej. Każdy atom drugorzędnego mostka jest numerowany zaczynając od atomu sąsiadującego z przyczółkiem o wyższej numeracji.

Uwaga: Ta reguła zastępuje regułę A-32.23 w Zaleceniach z z 1979 roku (ref. 1) i regułę R-2.4.2.2 w Zaleceniach z 1993 roku (ref. 2).

Przykłady:



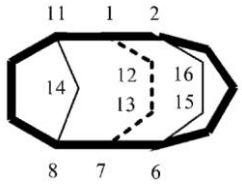
nie



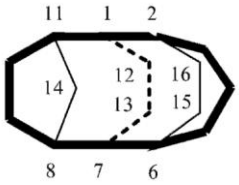
tetracyklo[4.4.2.2^{2,5}.2^{7,10}]heksadekan (PIN)
poprawnie

niepoprawnie

Wyjaśnienie: Pierwszy drugorzędny mostek, który powinien być numerowany, połączony jest z przyczółkiem o numeracji 10.



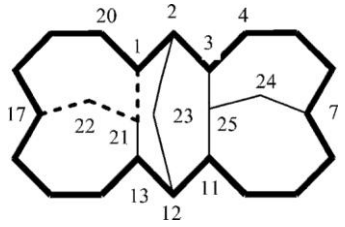
nie



tetracyklo[[5.4.2.2^{2,6}.1^{8,11}]heksadekan (PIN)

poprawnie niepoprawnie

(Pierwszy drugorzędny mostek, który powinien być numerowany, połączony jest z przyczółkiem o numeracji 11.)

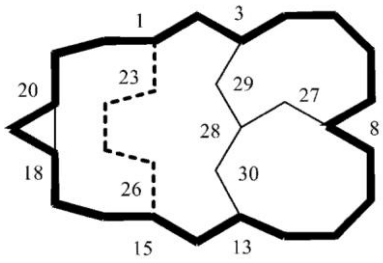


heksacyklo[15.3.2.2^{3,7}.1^{2,12}. 0^{13,21}.0^{11,25}]pentakozan

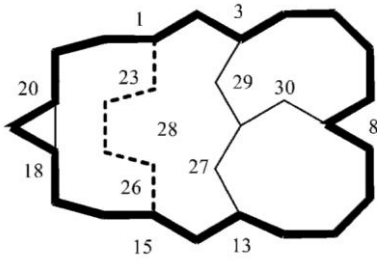
(wśród liczbowych deskryptorów zależny mostek drugorzędowy pomiędzy atomami o numeracji 11 i 25 wymieniany jest jako ostatni; podstawowy układ bicykliczny opisują liczby ‘15, 3 i 2’, liczby ‘2^{3,7}, 0^{13,21} i 0^{13,21}’ odpowiadają trzem niezależnym mostkom drugorzędnym; liczba ‘0^{11,25}’ odpowiada zależnemu mostkowi drugorzędnemu).

oktadekahydro-6,13-metano-2,14:7,9-dipropanodicyklohepta[*a,e*][8]annulen (PIN); (patrz P-25.4.3.4.2).

[nie oktahydro-7,14-metano-4,5,8,10-dipropanodicyklohepta[*a,d*][8]annulen; w poprawnej nazwie większa liczba pierścieni znajduje się w położeniu horyzontalnym, 3 wobec 2, patrz P-25.3.2.3.2(a) i P-44.2.2.2.3(b)].



nie



(I) **(II)**

poprawnie niepoprawnie

(I) pentacyklo[13.7.4.3^{3,8}.0^{18,20}.1^{13,28}]triakontan (PIN)

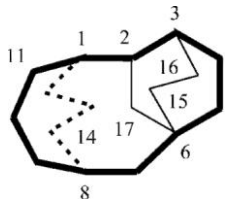
(II) pentacyklo[13.7.4.3^{3,13}.0^{18,20}.1^{8,28}]triakontan

Wyjaśnienie: w poprawnej nazwie (**I**) PIN, najpierw numerowany jest niezależny mostek przed zależnym mostkiem; sekwencja lokantów ‘3,8,18,20,13,28’ jest niższa od ‘3,13,18,20,8,28’ (patrz P-14.3.5)

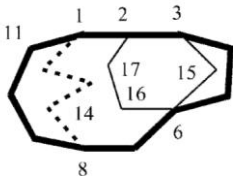
P-25.2.6.4 Jeżeli nadal istnieją możliwości wyboru numerowania drugorzędnych mostków należy uwzględniać kolejno jego następujące kryteria, aż do podjęcia jednoznacznej decyzji wyboru.

P-23.2.6.4.1 Niższe lokanty przypisuje się dla atomom połączonym z przyczółkami o najwyższej numeracji.

Przykłady:



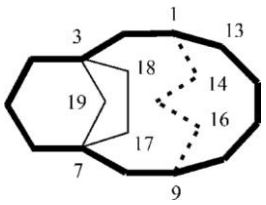
tetracyklo[6.3.3.$2^{3,6}$.$1^{2,6}$]heptadekan (PIN)
(lokanty 15 i 16 są przypisane mostkowi połączonemu z atomem przyczółka 3 a nie 2)



tetracyklo[6.3.3.$2^{2,6}$.$1^{3,6}$]heptadekan (PIN)
(lokant 15 jest przypisany do mostka połączonego z atomem przyczółka 3 a nie 2)

P-23.2.6.4.2 Dłuższe mostki numeruje się przed krótszymi.

Przykład:

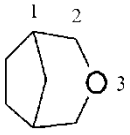


tetracyklo[7.4.3.$2^{3,7}$.$1^{3,7}$]nonadekan (PIN)
(dwuatomowy mostek pomiędzy atomami przyczółka 3 i 7 numerowany jest przed jednoatoatomowym mostkiem pomiędzy tymi samymi atomami przyczółka)

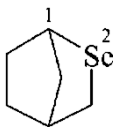
P-23.3 HETEROGENICZNE HETEROCYKLICZNE MACIERZYSTE WODORKI VON BAEYERA

P-23.3.1 Jedyną ogólną metodą nazywania heterogenicznych heterocyklicznych układów von Baeyera jest nomenklatura zamienna (‘a’) szkieletu. Przedrostki zamienne (‘a’) wskazujące heteroatom umieszcza się przed nazwą odpowiedniego węglowodoru nazwanego zgodnie z P-23.2 i wymienia w porządku: F > Cl > Br > I > O > S > Se > Te > N > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al > Ga > In > Tl. Numerowanie podporządkowane jest ustalonej najpierw numeracji układu węglowodoru.

Przykłady:



3-oksabicyko[3.2.1]oktan (PIN)

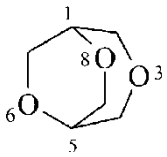


2-selenabicyklo[2.2.1]heptan (PIN)

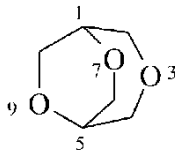
P-23.3.2 Kiedy istnieje możliwość różnego numerowania bierze się pod uwagę kolejno następujące kryteria aż do podjęcia decyzji o jego właściwym wyborze.

P-23.3.2.1 Niskie lokanty przypisuje się heteroatomom traktowanym jako zespół o rosnącym liczbowo porządku. Preferowana jest numeracja zespołu o najniższych indeksach liczbowych w pierwszym miejscu wystąpienia różnicy.

Przykład:



nie

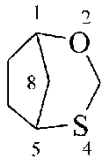


3,6,8-trioksabicyklo[3.2.2]nonan (PIN) 3,7,9-trioksabicyklo[3.2.2]nonan

Wyjaśnienie: Zespół lokantów ‘3,6,8’ jest niższy od ‘3,7,9’ (patrz P-14.3.5)

P-23.3.2.2 Jeżeli nadal istnieje możliwość wyboru, niskie lokanty przypisuje się zgodnie z malejącym porządkiem starszeństwa heteroatomów: O > S > Se > Te > N > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al > Ga > In > Tl.

Przykład:



2-oksa-4-tia-bicyklo[3.2.1]oktan (PIN)

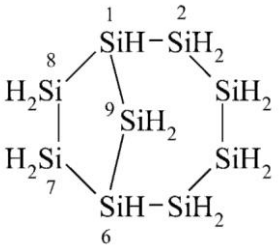
P-23.4 HOMOGENICZNE HETEROCYKLICZNE MACIERZYSTE WODORKI VON BAEYERA

Heterocykliczne układy von Baeyera utworzone wyłącznie z tych samych heteroatomów nazywa się:

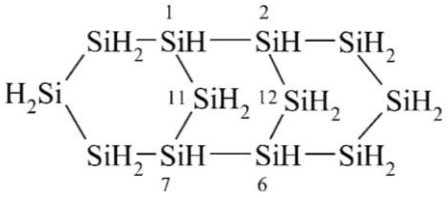
(a) jak opisano dla bi- i policyklicznych węglowodorów w P-23.2 używając nazwy acyklicznego macierzystego wodorku o tej samej całkowitej liczbie atomów szkieletu albo
(b) nomenklaturą zamienną szkieletu, stosując przedrostki zamienne (‘a’) opisane w P-15.4.2.2, w której całkowita liczba heteroatomów wskazana jest liczbowym terminem.

W obu metodach nie ma potrzeby podawania lokantów heteroatomów ponieważ wszystkie pozycje zmodyfikowane są przez ten sam heteroatom. Nazwy wstępnie wybrane (patrz P-12.2) używane do tworzenia preferowanych nazw IUPAC (PIN) organicznych pochodnych opisano w P-52.1.5.

Przykłady:



(a) bicyklo[4.2.1]nonasilan
(nazwa wstępnie wybrana; patrz P-12.2)
(b) nonasilabicyklo[4.2.1]nonan



(a) tricyklo[5.3.1.1^{2,6}]dodekasilan
(nazwa wstępnie wybrana; patrz P-12.2)
(b) dodekasilatricyklo[5.3.1.1^{2,6}]dodekan

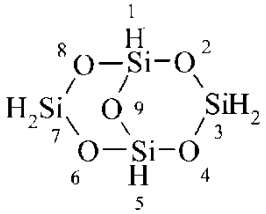
P-23.5 HETEROGENICZNE HETEROCYKLICZNE MACIERZYSTE WODORKI VON BAEYERA UTWORZONE Z WYSTĘPUJĄCYCH NA PRZEMIAN HETEROATOMÓW

P-23.5.1 Heterogeniczne układy von Baeyera utworzone z na przemian występujących heteroatomów szkieletu nazywane są dwojako:

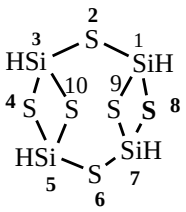
(a) wymieniając nierozłączny przedrostek ‘bicyklo’, ‘tricyklo’, etc. przed deskryptorem von Baeyera (patrz P-23.2.2, P-23.2.5 i P-23.2.6) ujętym w nawiasie kwadratowym a następnie, kolejno:
(i) zwielokrotniające przyrostki, ‘di’, ‘tri’, etc., określające liczbę heteroatomów wymienianych w pierwszej kolejności jako człony zamienne (‘a’);
(ii) człony zamienne (‘a’) szkieletu w odwrotnym porządku do zalecanego starszeństwa przedrostków (‘a’) (na przykład , Si przed O; patrz P-23.3.1);
(iii) końcówkę ‘an’.
(b) Stosując zwykłą nomenklaturę zamienną (‘a’) szkieletu do odpowiedniego węglowodoru.

Nazwy wstępnie wybrane (patrz P-12.2) używane do tworzenia preferowanych nazw IUPAC (PIN) organicznych pochodnych opisano w P-52.1.7.

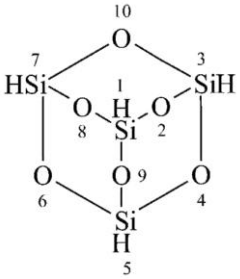
Przykłady:



(a) bicyklo[3.3.1]tetrasiloksan(nazwa wstępnie wybrana; patrz P-12.2)
(b) 2,4,6,8,9-pentaoksa-1,3,5,7-tetrasilabicyklo[3.3.1]nonan



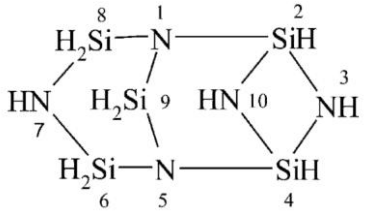
(a) tricyklo[5.1.1.1^{3,5}]tetrasilatian (nazwa wstępnie wybrana; patrz P-12.2)
(b) 2,4,6,8,9,10-heksatia-1,3,5,7-tetrasilacyklo[5.1.1.1^{3,5}]dekan



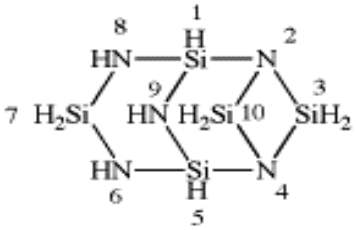
(a) tricyklo[3.3.1.1^{3,7}]tetrasiloksan (nazwa wstępnie wybrana; patrz P-12.2)
(b) 2,4,6,8,9,10-heksaoksa-1,3,5,7-tetrasilatricyklo[3.3.1.1^{3,7}]dekan

P-23.5.2 Przedrostków '*Si*' lub '*N*' poprzedzonych, pisaną kursywą, cyfrą '*1*' używa się kiedy zachodzi potrzeba określenia przyczółkowego atomu, który powinien mieć lokant '1'. Nazwy wybierane są jako (a) lub (b) zgodnie z dwoma metodami opisanymi w P-23.5.1.

Przykłady:



(a) *1N*-tricyklo[3.3.1.1^{2,4}]pentasilazan (nazwa wstępnie wybrana; patrz P-12.2
(b) 1,3,5,7,10-pentaaza-2,4,6,8,9-pentasilatricyklo[3.3.1.1^{2,4}]dekan

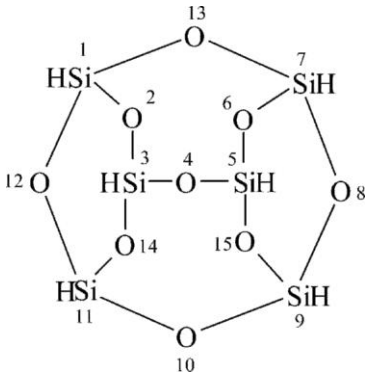


(a) *1Si*-tricyklo[3.3.1.1^{2,4}]pentasilazan (nazwa wstępnie wybrana; patrz P-12.2)
(b) 2,4,6,8,9-pentaaza-1,3,5,7,10-pentasilatricyklo[3.3.1.1^{2,4}]dekan

P-23.5.3 Silaseskwioksany, silaseskwitiany, etc.

Związki, w których każdy atom krzemu jest połączony z trzema atomami tlenu i każdy atom tlenu jest połączony z dwoma atomami krzemu mają ogólną nazwę silaseskwioksany. Podobnie, związki z atomami tlenu zastąpionymi atomami siarki, selenu, telluru bądź azotu, mają ogólną nazwę seskwitiany, seskwiazany i tak dalej. Ich nazwy szczegółowe tworzy się metodą opisaną w P-23.5.1(a). Seskwioksany mają ogólny wzór sumaryczny $Si_{2n}H_{2n}O_{3n}$. Nazwy tetrasilaseskwioksan (n = 2), heksasilaseskwioksan (n = 3), etc. są nazwami klasowymi wskazującym na $Si_{2n}H_{2n}E_{3n}$ gdzie E = O; i podobnie kiedy E = S, Se, Te lub N. Ogólny wzór sumaryczny silaseskwiazanów jest $Si_{2n}H_{5n}N_{3n}$.

Przykład:

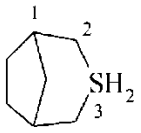


tetracyklo[5.5.1.1^{3,11}.1^{5,9}]heksasiloksan (heksasilaseskwioksan)
2,4,6,8,10,12,13,14,15-nonaoksa-1,3,5,7,9,11-heksasilatetracyklo[5.5.1.1^{2,11}.1^{5,9}]pentadekan (nazwa wstępnie wybrana; patrz P-12.2)

P-23.6 HETEROCYKLICZNE POLIALICYKLICZNE MACIERZYSTE WODORKI ZAWIERAJĄCE HETEROATOMY O NIESTANDARDOWEJ WIĄZALNOŚCI

P-23.6.1 Do wskazania heteroatomów o niestandardowej wiązalności stosuje się konwencję λ, posługującą się symbolem λ^n gdzie n oznacza wiązalność heteroatomu, stosuje się (patrz P-14.1). Symbol λ jest umieszczany przed odpowiednim przedrostkiem ‘a’.

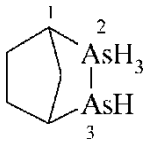
Przykład:



3λ^4-tiabicyklo[3.2.1]oktan (PIN)

P-23.6.2 Kiedy istnieje możliwość wyboru numeracji niskie lokanty przypisuje się heteroatomom o niestandardowej wiązalności wyrażonej symbolem λ^n w porządku malejącej liczbowo wiązalności. Na przykład, w przypadku atomów arsenu niższy lokant uzyskuje atom λ^5 arsenu.

Przykład:

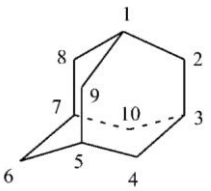


2λ^5,3-diarsabicyklo[2.2.1]heptan (PIN)

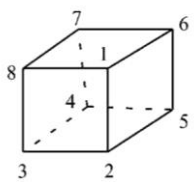
P-23.7 ZACHOWANE NAZWY MACIERZYSTYCH WODORKÓW VON BAEYERA

Zachowane nazwy adamantan i kuban używane są w ogólnej nomenklaturze i jako preferowane nazwy IUPAC. Nazwę chinuklidyna zachowuje się tylko w ogólnej nomenklaturze (patrz Tabela 2.6). Nazwa pryzman nie jest już zalecana.

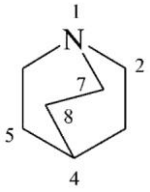
Tabela 2.6 Zachowane nazwy macierzystych wodorków von Baeyera



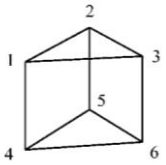
adamantan (PIN)
tricyklo[3.3.1.1^{3,7}]dekan



kuban (PIN)
pentacyklo[4.2.0.0^{2,5}.0^{3,8}.0^{4,7}]oktan



chinuklidyna
1-azabicyklo[2.2.2]oktan (PIN)



tetracyklo[2.2.0.$0^{2,6}$.$0^{3,5}$]heksan
(nie pryzman)

P-24 SPIRANOWE UKŁADY PIERŚCIENI

P-24.0 Wprowadzenie
P-24.1 Definicje
P-24.2 Spiranowe układy pierścieni wyłącznie z monocyklicznymi składnikami pierścieniowymi
P-24.3 Układ pierścieni monospiranowych zawierający dwa identyczne policykliczne składniki pierścieniowe
P-24.4 Trzy spiroskondensowane identyczne policykliczne składniki pierścieniowe
P-24.5 Monospiranowe układy pierścieni z różnymi składnikami pierścieniowymi, z których co najmniej jeden jest policyklicznym układem pierścieni
P-24.6 Nierozgałęzione polispiranowe układy z różnymi składnikami pierścieniowymi, z których jeden jest policyklicznym układem pierścieni
P-24.7 Rozgałęzione polispiranowe układy pierścieni
P-24.8 Spiranowe układy pierścieni zawierające atomy o niestandardowej wiązalności

P-24.0 WPROWADZENIE

Podrozdział ten opiera się na niedawnej publikacji „Extention and Rules of the Nomenclature for Spiro Compounds, IUPAC Recommendations 1999 (ref. 8). Zastępuje reguły A-41, A-42, B-10 i B-12 w Rekomendacjach z 1979 roku (ref. 1) i regułę R-2.4.3 w Zaleceniach z 1993 roku (ref. 2). Alternatywne metody podane w regułach A-42 i B-11 w Rekomendacjach z 1979 roku zostały zarzucone.

W podrozdziale P-24.5.2 wprowadzono odpowiednie modyfikacje do podrozdziału SP-4.1 publikacji z 1999 roku (ref. 8). Innych modyfikacji w publikacji z 1999 roku (ref. 8) nie wprowadzono.

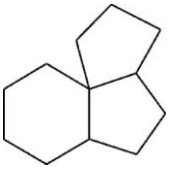
W tym podrozdziale pojawiają się układy pierścieni spiranowych składające się z tylko z nasyconych monocyklicznych pierścieni; układy nienasycone patrz podrozdział P-31.1.5.1.

Nazywanie podstawników patrz podrozdziały P-29 i P-32.1.3.

P-24.1 DEFINICJE

‘Złącze spiranowe’ jest połączeniem dwóch pierścieni, to jest jednym atomem wspólnym dla obu pierścieni. ‘Wolne złącze spiranowe’ jest połączeniem, które stanowi wyłączne, bezpośrednie złącze pomiędzy dwoma pierścieniami.

wolne złącze spiranowe



nie-wolne złącze spiranowe

Wspólny atom nazywa się ‘atomem spiranowym’. W zależności od liczby atomów spiranowych wyróżnia się związki z monospiranowymi, dispiranowymi, trispiranowymi, etc. układami pierścieni. Przedstawione zalecenia odnoszą się wyłącznie do nazywania macierzystych wodorków zawierających wolne złącze spiranowe. Nazywanie związków z nie-wolnym złączem spiranowym opisano w nomenklaturze układów skondensowanych (patrz P-25 i ref. 8).

Spiroskondensowanie polega na wprowadzeniu jednego i tylko jednego wspólnego atomu, pomiędzy dwa pierścieniami lub układy pierścieni,. Każdy z pierścieni lub układów pierścieni wnosi jeden i tylko jeden atom do spiranowego układu pierścieni. Jest to analogiczne do *orto*- lub *orto* i *peri*-skondensowania, które tworzy wspólne wiązania pomiędzy ‘mancude’ pierścieniami lub układami pierścieni. Tradycyjnie, *orto*- lub *orto*- i *peri*-skondensowanie nazywane było ‘skondensowaniem’ bez określenia jego określonego typu. Dlatego aby uniknąć niejednoznaczności termin ‘spiro’ należy zawsze dodawać do terminu ‘skondensowanie’.

P-24.2 SPIRANOWE UKŁADY PIERŚCIENI ZBUDOWANE WYŁĄCZNIE Z MONOCYKLICZNYCH PIERŚCIENI

P-24.2.0 Wprowadzenie
P-24.2.1 Monospiranowe alicykliczne układy pierścieni
P-24.2.2 Liniowe polispiranowe alicykliczne układy pierścieni
P-24.2.3 Rozgałęzione polispiranowe alicykliczne układy pierścieni
P-24.2.4 Heterocykliczne spiranowe układy pierścieni

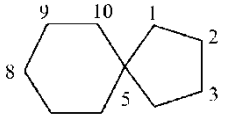
P-24.2.0 Wprowadzenie

Ten podrozdział dotyczy tylko nasyconych spiranowych układów pierścieni zawierających wyłącznie układy monocykliczne. Nienasycone alicykliczne spiranowe układy pierścieni omawia podrozdział P-31.1.5.

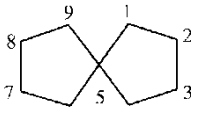
P-24.2.1 Monospiranowe alicykliczne układy pierścieni

Monospiranowe macierzyste wodorki składające się z dwóch nasyconych pierścieni cykloalkanowych nazywa się umieszczając nierozłączny przedrostek przed nazwą nierozgałęzionego acyklicznego węglowodoru o tej samej całkowitej liczbie atomów szkieletu. Liczbę szkieletowych atomów w każdym pierścieniu, połączonych z atomem spiranowym, wskazuje się arabskimi liczbami oddzielonymi kropką, wymienianymi w rosnącym porządku i zamkniętymi w nawiasach kwadratowych. Ten deskryptor (nazwany w obecnych zaleceniach ‘deskryptorem spiranowym von Baeyera’) umieszcza się pomiędzy przedrostkiem spiro i nazwą acyklicznego alkanu. Numerację zaczyna się w mniejszym pierścieniu, jeśli taki istnieje, od atomu sąsiadującego z atomem spiranowym, prowadzi wokół tego pierścienia, przez atom spiranowy a następnie wokół drugiego pierścienia.

Przykłady:



spiro[4.5]dekan (PIN)

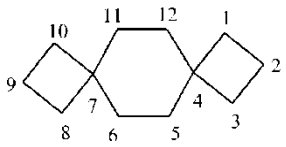


spiro[4.4]nonan (PIN)

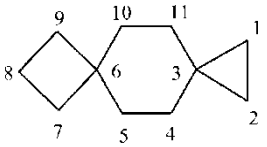
P-24.2.2. Liniowe polispiranowe alicykliczne układy pierścieni

Polispiranowe wodorki macierzyste składające się z nierozgałęzionych zespołów trzech lub więcej nasyconych pierścieni cykloalkanowych nazywa się używając, w zależności od liczby występujących atomów spiranowych, przedrostka ‘dispiro’, ‘trispiro’, etc. umieszczanego przed nazwą węglowodoru o tej samej liczbie atomów szkieletowych. Liczby arabskie deskryptora spiranowego von Baeyera wskazują liczbę atomów węgla łączących atomy spiranowe. Wymienia się je w porządku zaczynając od mniejszego końcowego pierścienia, jeśli taki występuje, postępując kolejno, zawsze krótszą ścieżką, do drugiego końcowego pierścienia przez każdy atom spiranowy a następnie z powrotem do pierwszego atomu spiranowego. Liczby oddziela się kropkami i zamyka w nawiasach kwadratowych. Związek numerowany jest w porządku, w którym wymieniane są liczby deskryptora spiranowego von Baeyera, włączając po raz pierwszy napotkane atomy spiranowe. Za każdym razem napotkania atomu spiranowego po raz drugi jego lokant, który został już przypisany, jest wymieniany w indeksie górnym liczby wskazującej liczbę poprzedzających łączących atomów.

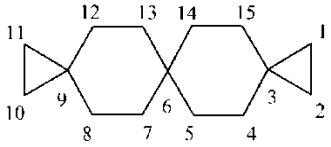
Przykłady:



dispiro[3.2.3^{7}.2^{4}]dodekan (PIN)



dispiro[2.2.3^{6}.2^{3}]undekan (PIN)

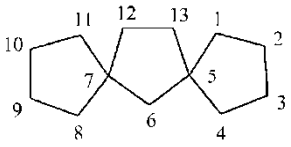


trispiro[2.2.2^{9}2^{6}.2^{3}]pentadekan (PIN)

Stosowanie cyfr w indeksie górnym zostało wprowadzone w publikacji „Extension and Revision of the Nomenclature for Spiro Compounds and IUPAC Recommendations1999” (ref. 8). Chociaż nie są one potrzebne w nazwach związków dispiranowych ich użycie do utworzenia jednoznacznej nazwy rozgałęzionych układów spiranowych jest niezbędne. Dlatego zaleca się aby stosować je do nazywania wszystkich związków polispiranowych, zwłaszcza kiedy potrzebna jest preferowana nazwa IUPAC.

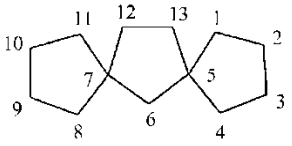
P-24.2.2.1 Jeżeli możliwy jest wybór liczb deskryptora spiranowego wybiera się mniejsze liczby, ponieważ niskie lokanty muszą być przeznaczone dla atomów spiranowych.

Przykłady:



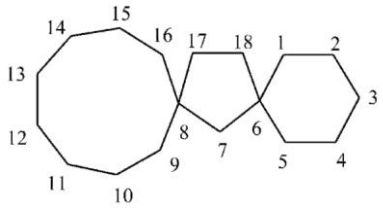
dispiro[4.1.4^{7}.2^{5}]tridekan (PIN)
poprawnie

nie



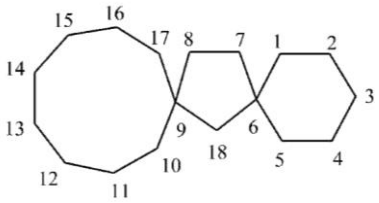
dispiro[4.2.4^{8}.2^{5}]tridekan
niepoprawnie

Wyjaśnienie: W poprawnej nazwie zestaw liczb ‘4,1’ jest niższy od ‘4,2’ i/lub zestaw lokantów atomów spiranowych ‘5,7’ jest mniejszy niż ‘5,8’.



dispiro[5.1.8^{8}.2^{6}]oktadekan (PIN)
poprawnie

nie

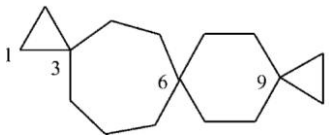


dispiro[5.2.8^{9}.1^{6}]oktadekan
niepoprawnie

Wyjaśnienie: W poprawnej nazwie zestaw liczb ‘5,1’ jest niższy od ‘5,2’ i/albo zestaw lokantów atomów spiranowych ‘6,8’ jest mniejszy niż ‘6,9’.

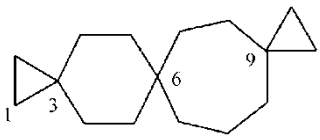
P-24.2.2.2 Jeżeli nadal istnieje możliwość wyboru numerowania rozważa się liczby deskryptorów von Baeyera w kolejności porządku ich wymieniania. Wybiera się nazwę z niższymi liczbami w pierwszym miejscu różnicy.

Przykład:



trispiro[2.2.2.2^{9}.2^{6}.3^{3}]heksadekan (PIN)
poprawna

nie



trispiro[2.2.2.2^{9}.3^{6}.2^{3}]heksadekan
niepoprawna

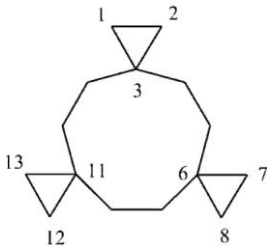
Wyjaśnienie: W poprawnej nazwie zestaw liczb ‘2.2.2.2^{9}.2^{6}.3^{3}’ jest niższy od zestawu ‘2.2.2.2^{9}.3^{6}.2^{3}’.

P-24.2.3 Rozgałęzione polispiranowe alicykliczne układy pierścieni

Rozgałęzione polispiranowe węglowodory, utworzone wyłącznie z pierścieni cykloalkanowych, nazywa się umieszczając przedrostki ‘dispiro’, ‘trispiro’, etc. przed nazwą acyklicznego węglowodoru odpowiadającego całkowitej liczbie występujących atomów szkieletu. Liczby arabskie deskryptorów spiranowych von Baeyera, wskazujących liczbę atomów węgla łączących atomy spiranowe, wymienia się kolejno zaczynając od mniejszego końcowego pierścienia, jeśli taki występuje, postępując kolejno do następnych końcowych pierścieni, przez każdy atom spiranowy, zawsze krótszą ścieżką, a następnie z powrotem do pierwszego atomu spiranowego.

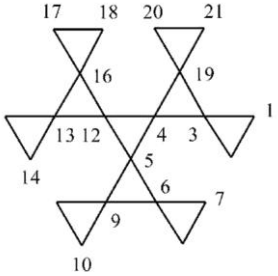
Liczby oddziela się kropkami i zamyka w nawiasach kwadratowych. Związek numeruje się w porządku, w którym wymieniane są napotykane po raz pierwszy liczby deskryptora spiranowego von Baeyera, włączając atomy spiranowe. Za każdym razem napotkania atomu spiranowego po raz drugi jego lokant, który już został przypisany, jest wymieniany w indeksie górnym liczby wskazującej liczbę poprzedzających atomów łączących.

Przykłady



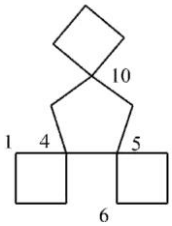
trispiro[2.2.2^{6}.2.2^{11}.2^{3}]pentadekan (PIN)

(ten i trzeci przykład w P-24.2.2 ilustrują znaczenie cyfr w indeksie górnym.
Bez indeksów górnych te dwa różne związki miałyby taką samą nazwę)



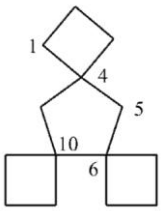
nonaspiro[2.0.0.0.2^{6}.0.2^{9}.0^{5}.0.0.2^{13}.0.2^{16}.0^{12}.0^{4}.0.2^{19}.0^{3}]henikozan (PIN)

P-24.2.3.1 Jeśli istnieje możliwość wyboru numerowania najniższe lokanty przypisuje się atomom spiranowym



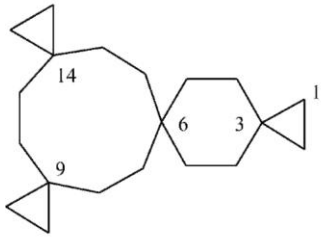
trispiro[3.0.3^{5}.1.3^{10}.1^{4}]tetradekan (PIN)
poprawnie

nie

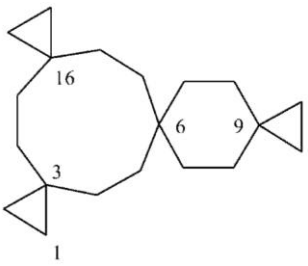


trispiro[3.1.3^{6}.0.3^{10}.1^{4}]tetradekan
niepoprawnie

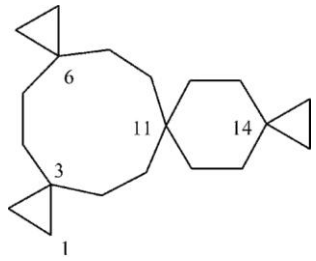
Wyjaśnienie: W porawnej nazwie zestaw liczb deskryptora ‘3,0’ jest niższy od ‘3.1’ i/lub zestaw lokantów atomów spiranowych ‘4,5,10’ jest niższy od ‘4,6,10’.



tetraspiro[2.2.2.2^{9}.2.2^{14}.2^{6}.2^{3}]ikozan (PIN)
poprawnie



tetraspiro[2.2.2.2^{9}.2^{6}.2.2^{16}.2^{3}]ikozan
niepoprawnie

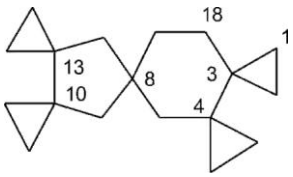


tetraspiro[2.2.2^{6}.2.2.2^{14}.2^{11}.2^{3}]ikozan
niepoprawnie

Wyjaśnienie: W poprawnej nazwie zestaw lokantów spiranowych ‘3,6,9,14’jest niższy od zestawów ‘3,6,9,16’albo ‘3,6,11,14’.

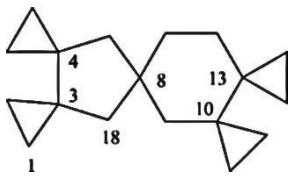
P-24.2.3.2 Jeżeli nadal istnieje możliwość wyboru numeracji bierze się pod uwagę liczby deskryptora von Baeyera w kolejności ich wymieniania. Poprawna nazwa, w miejscu pierwszej różnicy, ma niższe liczby

Przykład:



pentaspiro[2.0.2^{4}.1.1.2^{10}.0.2^{13}.1^{8}.2^{3}]oktadekan (PIN)

poprawnie



pentaspiro[2.0.2^{4}.1.1.2^{10}.0.2^{13}.2^{8}.1^{3}]oktadekan

niepoprawnie

Wyjaśnienie: W poprawnej nazwie, PIN, sekwencja liczb deskryptora ‘2.0.2.1.1.2.0.2.1.2’ jest niższa od sekwencji liczb ‘2.0.2.1.1.2.0.2.2.1’ dla niepoprawnej nazwy na dziewiątym miejscu; liczba ‘1’ jest niższa od ‘2’

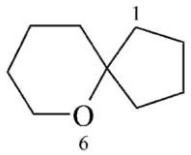
P-24.2.4 Heterocykliczne spiranowe układy pierścieni

P-24.2.4.1 Heterocykliczne spiranowe układy pierścieni nazywane w nomenklaturze zamiennej (‘a’) szkieletu
P-24.2.4.2 Homogeniczne heterocykliczne spiranowe układy pierścieni wyłącznie z monocyklicznymi składnikami pierścieniowymi
P-24.2.4.3 Heterocykliczne spiranowe układy pierścieni wyłącznie z monocyklicznymi składnikami pierścieniowymi utworzonymi z występujących na przemian heteroatomów

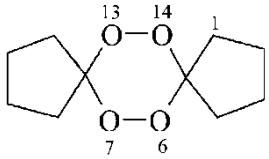
P-24.2.4.1 Heterocykliczne spiranowe układy pierścieni nazywane w nomenklaturze zamiennej (‘a’) szkieletu

P-24.2.4.1.1 Kiedy w układzie spiranowym utworzonym wyłącznie z pierścieni monocyklicznych występuje heteroatom, do nazwania heterocyklicznego układu używa się nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu. Najpierw, w sposób opisany powyżej (P-24.2), tworzy się nazwę odpowiedniego węglowodorowego układu pierścieni, następnie wprowadza się do niej heteroatomy stosując ogólne zasady nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu. W wyniku wprowadzenia heteroatomów numerowanie spiranowego węglowodorowego układu pierścieni nie ulega modyfikacji, ale jeśli istnieje możliwość wyboru heteroatomom przypisuje się niskie lokanty.

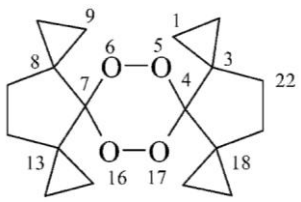
Przykłady:



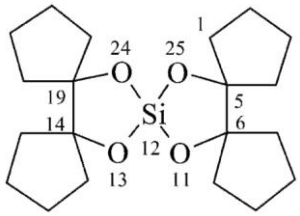
6-oksaspiro[4.5]dekan (PIN) (nie 10-oksaspiro[4.5]dekan)



6,7,13,14-tetraoksadispiro[4.2.4^{8}.2^{5}]tetradekan (PIN)



5,6,16,17-tetraoksaheksaspiro[2.0.2.0.2^{8}.2.2^{13}.0^{7}.2^{4}.0.2^{18}.2^{3}]dokozan (PIN)

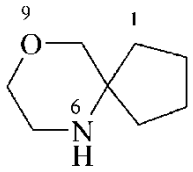


11,13,24,25-tetraoksa-12-silapentaspiro[4.0.4^{6}.1.1.4^{14}.0.4^{19}.1^{12}.1^{5}]pentakozan (PIN)

P-24.2.4.1.2 Jeżeli z powodu obecności heteroatomów istnieje możliwość wyboru nazwy lub numerowania, należy uwzględnić kolejno następujące kryteria:

(a) Niskie lokanty przypisuje się heteroatomom jako zestawowi, niezależnie od ich rodzaju.

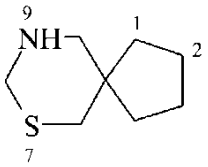
Przykład:



9-oksa-6-azaspiro[4.5]dekan (PIN)

(b) Jeżeli nadal istnieje możliwość wyboru, niskie lokanty przypisuje się zgodnie z następującym malejącym porządkiem starszeństwa heteroatomów: F > Cl > Br > I > O > S > Se > Te > N > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb .> B > Al > Ga > In > Tl.

Przykład:

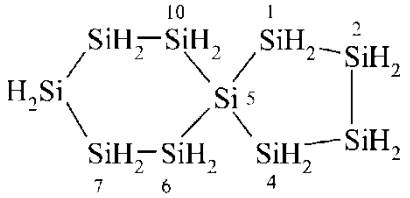


7-tia-9-azaspiro[4.5]dekan (PIN)

P-24.2.4.2 Homogeniczne heterocykliczne spiranowe układy pierścieni wyłącznie ze składnikami monocyklicznymi

Heterocykliczne spiranowe układy pierścieniowe zbudowane wyłącznie z monocyklicznych składników i z takich samych heteroatomów nazywa się jak opisano w P-24.2 używając nazwy homogenicznego heterocyklicznego układu pierścieni, który ma tę samą całkowitą liczbę heteroatomów szkieletu. Metoda ta jest preferowana względem nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu opisanej w P-24.2.4.1, w której całkowita liczba heteroatomów wskazywana jest terminem liczbowym. W obu metodach nie ma potrzeby podawania umiejscowienia heteroatomów ponieważ wszystkie pozycje są modyfikowane przez ten sam heteroatom. Nazwy wstępnie wybrane (patrz P-12.2) używane do tworzenia preferowanych nazw IUPAC (PIN) pochodnych organicznych opisano w P-52.1.5.

Przykład:



spiro[4.5]dekasilan
(nazwa wstępnie wybrana; patrz P-12.2)
dekasilaspiro[4.5]dekan

P-24.2.4.3 Heterocykliczne spiranowe układy pierścieni wyłącznie z monocyklicznymi składnikami utworzonymi z występujących na przemian heteroatomów

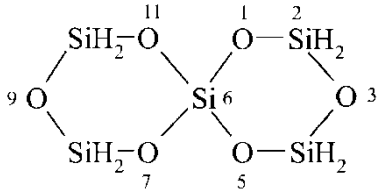
Heterocykliczne spiranowe układy pierścieni zawierające wyłącznie monocykliczne pierścienie z występującymi na przemian heteroatomami szkieletu nazywa się dwoma metodami.

(1) wymieniając przedrostki takie jak ‘spiro’, ‘dispiro’, etc. przed deskryptorem von Baeyera (wskazującym liczby heteroatomów dołączonych do każdego atomu spiro w każdym pierścieniu wymieniane w rosnącym porządku i oddzielone kropką) zamknięte w kwadratowym nawiasie, a następnie kolejno:
(a) przedrostek zwielokrotniający (‘di’, ‘tri’, etc.) wskazujący liczbę heteroatomów pierwszego wymienianego po nim członu ‘a’;
(b) terminy ‘a’ heteroatomów wymieniane w kolejności odwrotnej do porządku starszeństwa dla przedrostków ‘a’ (patrz P-21.2.31) , na przykład Si przed O;
(c) końcówkę ‘an’. Heterospiranowy układ numeruje się tak jak odpowiadający mu węglowodór.

(2) nomenklaturą zamienną (‘a’) szkieletu jaką opisano w P-24.2.4.1.

Nazwy wstępnie wybrane (patrz P-12.2) które używa się do tworzenia preferowanych nazw IUPAC (PIN) dla pochodnych organicznych podaje P-52.1.6.2.

Przykład:



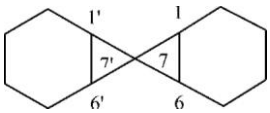
spiro[5.5]pentasiloksan (nazwa wstępnie wybrana; patrz P-12.2)
1,3,5,7,9,11-heksaoksa-2,4,6,8,10-pentasilaspiro[5.5]undekan

P-24.3 MONOSPIRANOWE UKŁADY PIERŚCIENI ZAWIERAJĄCE DWA IDENTYCZNE POLICYKLICZNE SKŁADNIKI

P-24.3.1 Monospiranowe układy pierścieni składające się z dwu identycznych policyklicznych składników pierścieniowych nazywa się umieszczając nierozłączny przedrostek ‘spirobi’ przed, zamkniętą w kwadratowym nawiasie, nazwą układu pierścieni składnika. Zachowuje się ustaloną numerację policyklicznego układu pierścieni składnika, przy czym jeden z układów otrzymuje

lokanty primowane. Umiejscowienie atomu spiro wskazuje się w nazwie za pomocą odpowiednich lokantów (pierwszy nieprimowany) umieszczanych na początku nazwy.

Przykład:

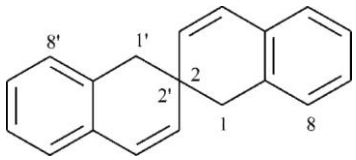


7,7′-spirobi[bicyklo[4.1.0]heptan] (PIN)

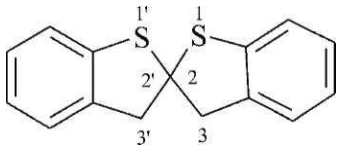
P-24.3.2 W odpowiednich przypadkach do całego szkieletu, dodaje się maksymalną liczbę nieskumulowanych wiązań podwójnych (to znaczy układ staje się ‘mancude’). Wskazane atomy wodoru (patrz P-14.7) pojedynczych składników nie są wymieniane (ref. 8). Nie wymienia się ich również jeżeli nie występują w układzie spiranowym. Jeżeli wskazany atom wodoru jest niezbędny, wymienia się go przed lokantami atomu spiro.

Uwaga: Takie stosowanie wskazanego atomu wodoru wprowadzono w publikacji z 1999 roku dotyczącej nomenklatury związków spiranowych (ref. 8)

Przykłady:

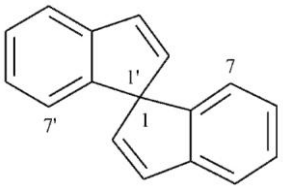


1*H*,1′*H*-2,2′-spirobi[naftalen] (PIN)

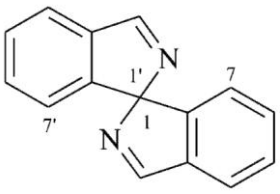


3*H*,3′*H*-2,2′-spirobi[[1]benzotiofen] (PIN)

Uwaga: W nazwie występuje podwójny zestaw kwadratowych nawiasów ponieważ wymagane są one zarówno w nazwie spiro jak i do zamknięcia lokantów należących do nazw składników (patrz P-16.5.2.2).



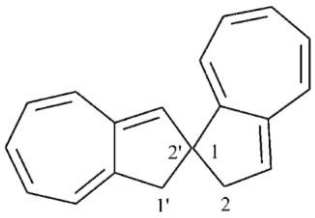
1,1′-spirobi[inden] (PIN)



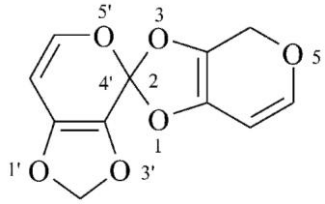
1,1′-spirobi[izoindol] (PIN)

P-24.3.3 Jeżeli istnieje możliwość wyboru przypisywania primowanych lokantów, niższa liczba przy atomie spiro jest nieprimowana.

Przykłady:

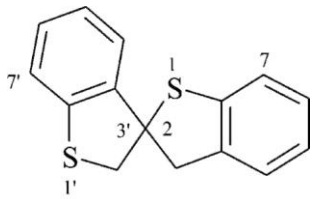


1′*H*,2*H*-1,2′-spirobi[azulen] (PIN)



2'H,4*H*,2,4′-spirobi[[1,3]dioksolo[4,5-*c*]piran] (PIN)

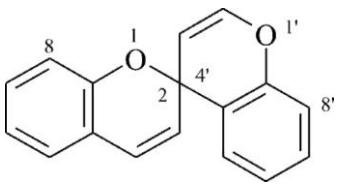
Uwaga: W nazwie występuje podwójny zestaw kwadratowych nawiasów ponieważ wymagane są zarówno w nazwie spiro jak i do zamknięcia lokantów należących do nazw składników (patrz P-16.5.2.2).



2′*H*,3*H*-2,3′-spirobi[[1]benzotiofen] (PIN)

Uwaga 1: Wskazany atom wodoru w pozycji 2′ może być pominięty w ogólnej nomenklaturze ale musi być wymieniony w preferowanej nazwie IUPAC.

Uwaga 2: W nazwie występuje podwójny zestaw kwadratowych nawiasów ponieważ wymagane są zarówno w nazwie spiro jak i do zamknięcia lokantów należących do nazw składników (patrz P-16.5.2.2).



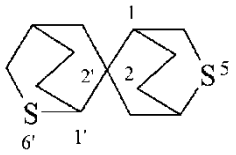
2,4′-spirobi[[1]benzopiran] (PIN)
2,4′-spirobi[chromen]

P-24.3.4 Heterocykliczne ‘spirobi’ układy pierścieniowe nazywane w nomenklaturze zamiennej (‘a’) szkieletu

Kiedy pierścieniowe składniki związków ‘bispiro’ są nazywane w nomenklaturze von Baeyera, heteroatomy wskazuje się za pomocą nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu. Układ ‘spirobi’ pierścieni nazywa się jak nasycony bi- lub policykliczny węglowodór alicykliczny, a heteroatomy wskazuje się członami ‘a’ wymienianymi przed pełną nazwą ‘spirobi’ węglowodoru. Jeżeli istnieje możliwość wyboru, niskie lokanty nadaje się atomowi spiro a następnie heteroatomom, tak jak opisano w podrozdziale P-24.2.4.1.

> **Uwaga:** Takie stosowanie przedrostków zamiennych ‘a’ szkieletu zostało wprowadzone w publikacji z 1999 roku o nomenklaturze związków spiranowych (ref. 8).

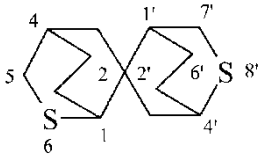
Przykłady:



(I)

poprawnie

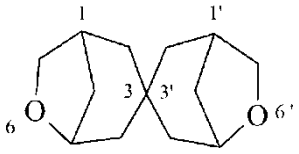
nie



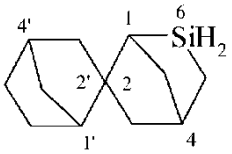
(II)

niepoprawnie

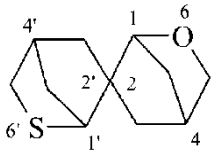
5,6′-ditia-2,2′-spirobi[bicyklo[2.2.2]oktan] (**I**) (PIN)
[nie 6,8′-ditia-2,2′-spirobi[2.2.2]oktan] (**II**); zestaw lokantów ‘5,6’’ w (**I**) jest niższy od ‘6,8’’ w (**II**)]



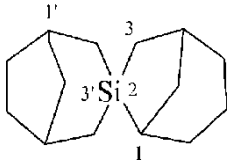
6,6′-dioksa-3,3′-spirobi[bicyklo[3.2.1]oktan] (PIN)



6-sila-2,2′-spirobi[bicyklo[2.2.1]heptan] (PIN)



6-oksa-6′-tia-2,2′-spirobi[bicyklo[2.2.1]heptan] (PIN)

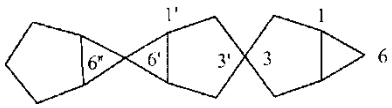


2-sila-2,3′-spirobi[bicyklo[3.2.1]oktan] (PIN)

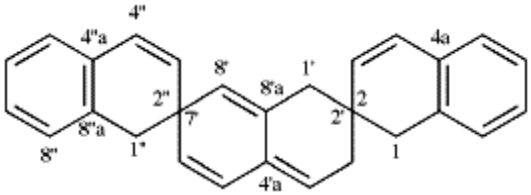
P-24.4 DISPIRANOWE UKŁADY PIERŚCIENI Z TRZEMA IDENTYCZNYMI POLICYKLICZNYMI UKŁADAMI PIERŚCIENIOWYMI RAZEM SKONDENSOWANYMI SPIRO

P-24.4.1 Dispiranowe układy pierścieni z trzema identycznymi policyklicznymi składnikami pierścieniowymi nazywa się przez umieszczenie nierozdzielnego przedrostka ‘dispiroter’ przed zamkniętą w kwadratowym nawiasie nazwą składowego układu pierścieni. Przedrostek zwielokrotniający ‘ter’ (patrz P-14.2.3) stosuje się dla wskazania powtarzalności identycznych składników pierścieniowych. Lokanty środkowego składnika pierścieniowego są primowane a trzeciego pierścieniowego składnika podwójnie primowane. Atomy spiro wskazuje się umieszczonymi przed nazwą dwoma parami lokantów oddzielonych dwukropkiem. Wskazany atom wodoru, jeśli występuje, wymienia się przed tymi lokantami.

Przykłady:



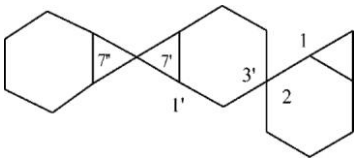
3,3′:6′,6′′-dispiroter[bicyklo[3.1]heksan] (PIN)



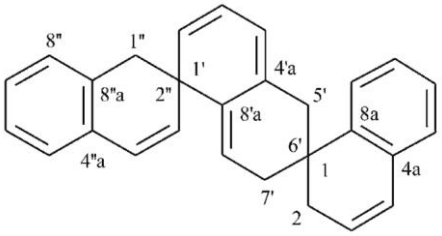
1*H*,1′*H*,1′′*H*,3′*H*-2,2′:7′,2′′-dispiroter[naftalen] (PIN)

P-24.4.2 Jeżeli istnieje możliwość wyboru lokanty wybiera się porównując je jako zestaw w rosnącym porządku, najniższy zestaw lokantów otrzymują atomy spiro, a jeśli nadal pozostaje możliwość wyboru, w porządku ich wymieniania w nazwie.

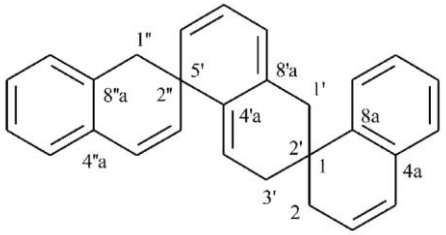
Przykłady:



2,3′:7′,7′′-dispiroter[bicyklo[4.1.0]heptan] (PIN)



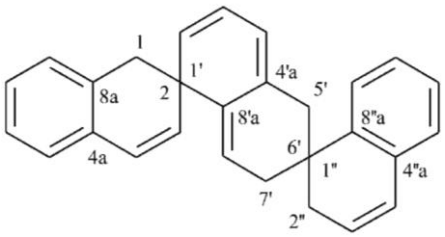
nie



(I)
poprawnie

(II)
niepoprawnie

nie



(III)
niepoprawnie

1′′*H*,2*H*,5′*H*,7′*H*-1,6′:1′,2′′-dispiroter[naftalen] (**I**) (PIN)
[nie 1′*H*,1′′*H*,2*H*,3′*H*,-1,2′:5′,2′′-dispiroter[naftalen] (**II**)
nie 1*H*,2′′*H*,5′*H*,7′*H*-2,1′:6′,1′′- dispiroter[naftalen] (**III**)]

Wyjaśnienie: zestaw lokantów ‘1,1′,2′′,6′’ w (**I**) jest niższy od ‘1,2′,2′′,5′’ w (**II**) lub ‘1′,1′′,2,6′’ w (**III**).

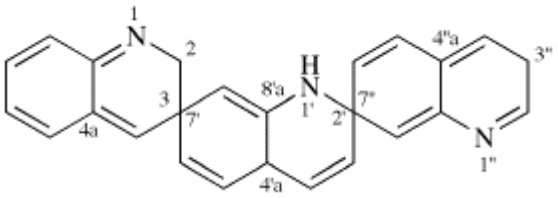
P-24.4.3 Trzy identyczne heterocykliczne spiroskondensowane razem składniki pierścieniowe

Dispiranowe związki z trzema identycznymi heterocyklicznymi składnikami można nazywać:

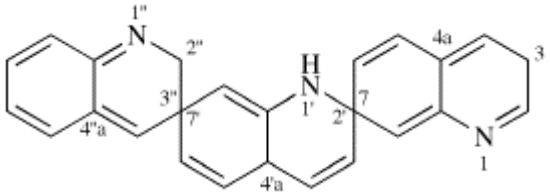
(a) używając heterocyklicznych monocyklicznych lub policyklicznych składników 'mancude' w ten sam sposób jak w przypadkuwęglowodorów ‘spiroter’ (patrz P-24.4.1); podstawą numeracji jest ustalona numeracja składnika heterocyklicznego;

(b) używając nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu kiedy pierścieniowe składniki są policyklicznymi układami pierścieni von Baeyera; numeracja węglowodoru ‘spiroter’ von Baeyera nie ulega zmianie.

Przykłady:

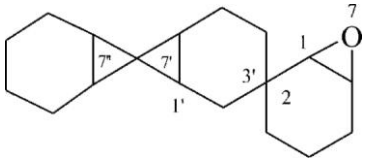


poprawnie
1′*H*,2*H*,3′′*H*,4′a*H*-3,7′:2′,7′-dispiroter[chinolina] (PIN)

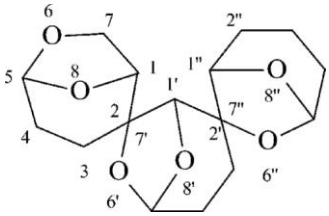


niepoprawnie
1′*H*,2′′*H*,3*H*,4′a*H*-7,2′:7′,3′′-dispiroter[chinolina]

Wyjaśnienie: zestaw lokantów ‘1′,2,3′’ ‘w poprawnej nazwie’, PIN, jest niższy od zestawu lokantów ‘1′,2′′,3′’ ‘w niepoprawnej’ nazwie.



7-oksa-2,3′:7′,7′′-dispiroter[bicyklo[4.1.0]heptan] (PIN)



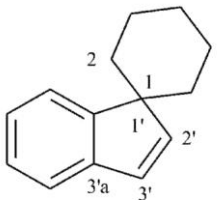
6,6′,6′′,8,8′,8′′heksaoksa[2,7′:2′,7′′]dispiroter[bicyklo[3.2.1]oktan] (PIN)

P-24.5 MONOSPIRANOWE UKŁADY PIERŚCIENI Z RÓŻNYMI SKŁADNIKAMI, Z KTÓRYCH PRZYNAJMNIEJ JEDEN JEST POLICYKLICZNYM UKŁADEM PIERŚCIENI

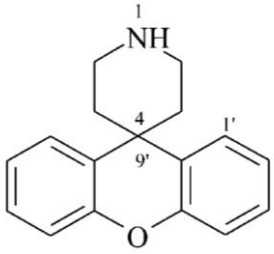
P-24.5.1 Nazwy monospiranowych układów pierścieni z różnymi składnikami pierścieniowymi, z których co najmniej jeden jest policyklicznym układem pierścieni do którego nie ma zastosowania nomenklatura zamienna (‘a’) tworzy się przez umieszczenie, w nawiasach kwadratowych, nazw składników pierścieniowych w porządku alfanumerycznym. Pozycję atomu spiro wskazuje się odpowiednimi lokantami oddzielonymi przecinkiem i umieszczonymi pomiędzy nazwami dwóch składników pierścieniowych. Lokanty drugiego pierścieniowego składnika są primowane, a wszystkie lokanty potrzebne do jego nazwania umieszcza się w nawiasach kwadratowych. Wskazany atom wodoru (patrz P-14.7), jeśli jest potrzebny w kompletnej strukturze, wymienia się na początku nazwy (P-24.3.2).

Uwaga: Przy nazywaniu policyklicznych spiranowych układów pierścieni składających się z różnych składników pierścieniowych, o kolejności wymieniania pierścieni decyduje ich porządek alfabetyczny a nie starszeństwo pierścieni lub układów pierścieni

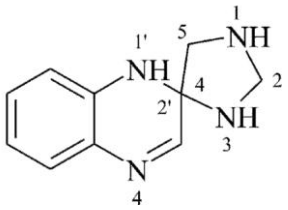
Przykłady:



spiro[cykloheksano-1,1′inden] (PIN)
(wskazany atom wodoru nie jest potrzebny, patrz P-24.3.2)



spiro[piperydyno-4,9′-ksanten] (PIN)
(wskazany atom wodoru nie jest potrzebny, patrz P-24.3.2)

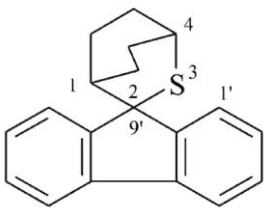


1′*H*-spiro[imidazolidyno-4,2′-chinoksalina] (PIN)

P-24.5.2 Monospiranowe układy pierścieni z różnymi składnikami pierścieniowymi, z których co najmniej jeden jest pierścieniem policyklicznym i co najmniej jeden składnik pierścieniowy wymaga użycia nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu, nazywa się jak w P-24.5.1; następnie wprowadza się przedrostki zamienne (‘a’) szkieletu wymieniając je przed terminem ‘spiro’.

Uwaga: Takie stosowanie wskazanego atomu wodoru wprowadzono w publikacji z 1999 roku dotyczącej nomenklatury związków spiranowych (ref. 8)

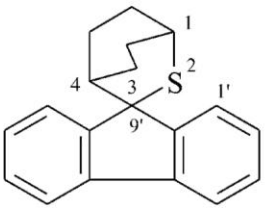
Przykłady:



(I)

poprawnie

nie



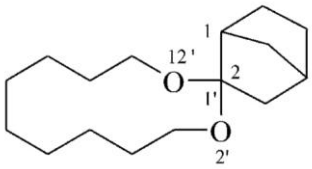
(II)

niepoprawnie

3-tiaspiro[bicyklo[2.2.2]oktano-2,9′-fluoren] (**I**) (PIN)
{nie 2-tiaspiro[bicyklo[2.2.2]oktano-3,9′-fluoren] (**II**)}

Wyjaśnienie: Zestaw lokantów ‘2,9’’ w (**I**) jest niższy od ‘3,9’’ w (**II**).

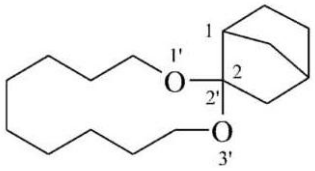
Uwaga: Format ‘poprawnej’ nazwy podany w SP-4.1 (ref. 8) spiro[fluoreno-9,2′-[3]tiabicyklo[2.2.2]oktan] obecnie nie jest zalecany.



(I)

poprawnie

nie



(II)

niepoprawnie

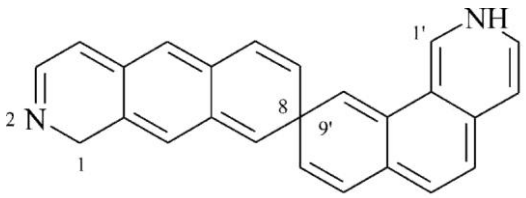
2′,12′-dioksaspiro[bicyklo[2.2.1]heptano-2,1′-cyklododekan] (**I**) (PIN)
{nie 1′,3′-dioksaspiro[bicyklo[2.2.1]heptano-2,2′-cyklododekan] (**II**)}

Wyjaśnienie: Atom spiro monocyklicznego składnika węglowodorowego jest preferowany przy nadawaniu niskiego lokantu.

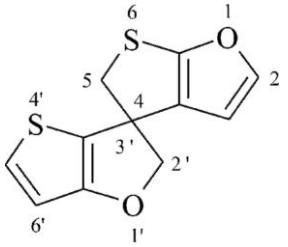
Uwaga: Format ‘poprawnej’ nazwy podany w SP-4.1 (ref. 8) spiro[bicyklo[2.2.1]heptano-2,1′-[2,12]dioksacyklododekan]obecnie nie jest zalecany.

P-24.5.3 Gdy to konieczne stosuje się, opisany w podrozdziałach P-14.5 i P-14.6, porządek alfanumeryczny. Jeśli rzymskie litery nie są wystarczające do rozróżnienia alfabetycznego pomiędzy dwoma składnikami pierścieniowymi stosuje się, w miarę potrzeby, kryteria oparte na pisanych kursywą literach i liczbach skondensowania, lokantach heteroatomów i liczbach deskryptorów von Baeyera. Lokanty występujące w bicyklicznych benzoskondensowanych składnikach pierścieniowych, jeśli odpowiadają numeracji spiranowego układu pierścieni, wymienia się bezpośrednio przed składnikiem i nazwą; jeśli nie odpowiadają numeracji spiranowego układu pierścieni umieszcza się je w kwadratowych nawiasach (patrz przykład trzeci i czwarty poniżej).

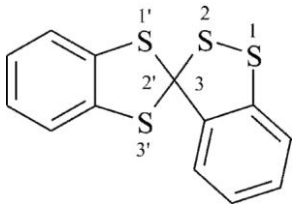
Przykłady:



1*H*,2′*H*-spiro[benzo[*g*]izochinolino-8,9′-benzo[*h*]izochinolina] (PIN)
(benzo[*g*]…. przed benzo[*h*]….)

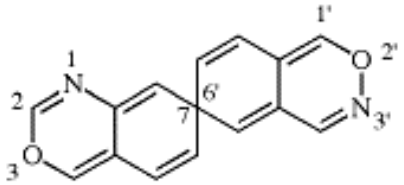


2′*H*,5*H*-spiro[tieno[2,3-*b*]furano-4,3′-tieno[3,2-*b*]furan] (PIN)
(…[2,3-*b*]… przed …[3,2-*b*]…)



spiro[[1,2]benzoditiolo-3,2′-[1,3]benzoditiol] (PIN)
(1,2-benzo…przed 1,3-benzo…)

Uwaga: W tej nazwie występuje podwójny zestaw nawiasów kwadratowych ponieważ wymaga ich nazwa spiranowa a ponadto są one użyte do zamknięcia lokantów należących do nazw składnika pierścieniowego (patrz P-16.5.2.2).

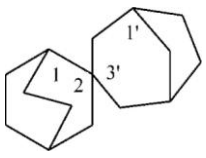


spiro[3,1]benzoksazyna-7,6′-[2,3]benzoksazyna] (PIN)
(3,1-benzoksazyna przed 2,3-benzoksazyną)

Uwaga: W tej nazwie występuje podwójny zestaw kwadratowych nawiasów ponieważ wymaga ich nazwa spiranowa a ponadto są one użyte do zamknięcia lokantów należących do nazw składnika pierścieniowego (patrz P-16.5.2.2).

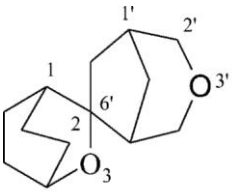
P-24.5.4 W przypadku układów pierścieni modyfikowanych w nomenklaturze zamiennej (‘a’) szkieletu, do nazwania układu pierścieni przed zastosowaniem takiej nomenklatury postępuje się jak opisano w P-24.5.2. Nie należy używać nazw pierścieniowych składników modyfikowanych w nomenklaturze zamiennej (‘a’) szkieletu, a kiedy zachodzi potrzeba, należy stosować się do P-24.5.3.

Przykłady:



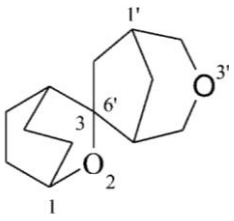
spiro[bicyklo[2.2.2]oktano-2,3′-bicyklo[3.2.1]oktan] (PIN)
{bicyklo[2.2.2]oktan jest wymieniany przed bicyklo[3.2.1]oktan}

Wyjaśnienie: Zestaw deskryptora ‘2.2.2’ jest niższy od ‘3.2.1’ (patrz P-14.3.5)



(I)
poprawnie

nie



(II)
niepoprawnie

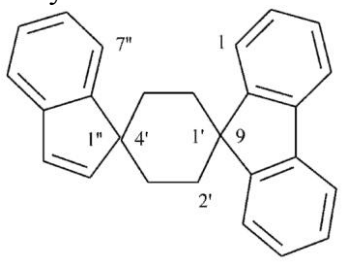
3,3′-dioksaspiro[bicyklo[2.2.2]oktano-2,6′-bicyklo[3.2,1]oktan] (**I**) (PIN)
{nie 2,3′-dioksaspiro[bicyklo[2.2.2]oktano-3,6′-bicyklo[3.2.1]oktan] (**II**)}

Wyjaśnienie: Atomy spiro są preferowane względem przedrostków zamiennych (‘a’) szkieletu przy nadawaniu niskich lokantów, a zestaw lokantów ‘2,6′’ w (**I**) (PIN) jest niższy od ‘3,6′’ w (**II**).

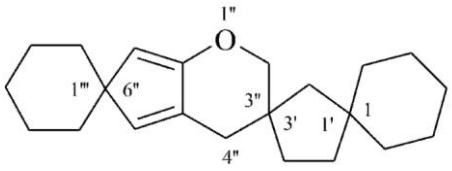
P-24.6 NIEROZGAŁĘZIONE POLISPIRANOWE UKŁADY PIERŚCIENI Z RÓŻNYMI SKŁADNIKAMI, Z KTÓRYCH JEDEN JEST UKŁADEM POLICYKLICZNYM

Nierozgałęzione polispiranowe układy pierścieni z co najmniej dwoma różnymi składnikami pierścieniowymi, z których co najmniej jeden jest pierścieniem policyklicznym nazywa się przez umieszczenie, w nawiasach kwadratowych, nazw składników pierścieniowych w porządku ich występowania w strukturze, zaczynając od końcowego składnika pierścieniowego niższego w porządku alfabetycznym. Nierozdzielne przedrostki wskazujące liczbę atomów spiro (‘dispiro’, ‘trispiro’, etc.) umieszcza się przed wziętymi w nawias nazwami składników pierścieniowych. Lokanty pierwszego wymienianego pierścienia nie są primowane, następnego składnika pierścieniowego są primowany i tak dalej. Lokanty potrzebne do nazw drugiego i następnych składników pierścieniowych zamyka się w nawiasach kwadratowych. Położenie atomów spiro wskazuje się odpowiednią parą lokantów, oddzielonych przecinkiem i umieszczonych pomiędzy każdą parą nazw składników pierścieniowych. Wskazany atom wodoru, użyty w miarę potrzeby, wymienia się przed przedrostkami ‘dispiro’, ‘trispiro’, etc. Jeśli obydwa końcowe układy pierścieni są takie same porządek wymieniania pierścieniowych składników układu jest ustala się na podstawie porównania drugiej od końca struktury pary składników pierścieniowych i tak dalej (dalszą dyskusję podaje podrozdział SP-5 w ref. 8).

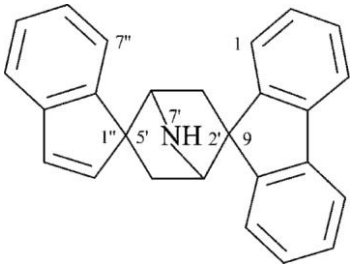
Przykłady:



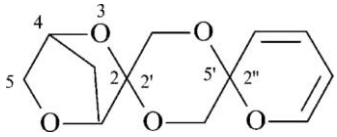
dispiro[fluoreno-9,1′-cykloheksano-4′,1′′-inden] (PIN)



2′′*H*,4′′*H*-trispiro[cykloheksano-1,1′-cykloheksano-3′,3′′-cyklopenta[*b*]piran-6′′,1′′′-cykloheksan] (PIN)



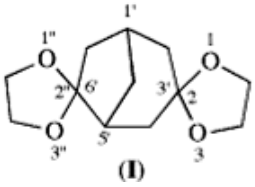
7′-azadispiro[fluoreno-9,2′-bicyklo[2.2.1]heptano-5′,1′′-inden] (PIN)

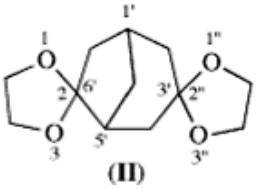


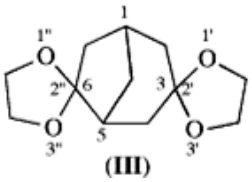
3,6-dioksadispiro[bicyklo[2.2.1]heptano-2,2′-[1,4]dioksano-5′,2′′-piran] (PIN)

P.24.6.1 Jeżeli istnieje możliwość wyboru lokantów, najniższy zestaw lokantów atomów spiro wybiera się, porównując je w rosnącym liczbowo porządku. Jeśli to nie wystarcza, bierze się pod uwagę porządek ich wymieniania w nazwie (patrz P-24.2.4.1).

Przykład:







poprawnie niepoprawnie niepoprawnie

dispiro[[1,3]dioksolano-2,3′-bicyklo[3.2.1]oktano-6′,2′′-[1,3]dioksolan] (**I**) (PIN)
{nie dispiro[[1,3]dioksolano-2,6′-bicyklo[3.2.1]oktano-3′,2′′-[1,3]dioksolan] (**II**);
zestawy lokantów ‘2,2′′,3′,6′’ są identyczne, ale w nazwie porządek wymieniania ‘2,3′,6′,2′′’ w (**I**) (PIN) jest niższy od ‘2,6′,3′,2′′’ w (**II**)}
nie dispiro[bicyklo[3.2.1]oktano-3,2′:6,2′′-bis[1,3]dioksolan] (III) (patrz P-24.7.1)

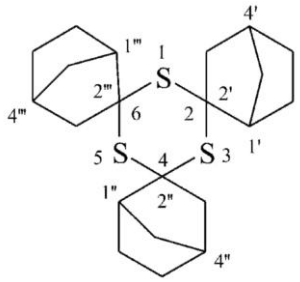
Uwaga: W powyższej nazwie zwyczajowej występuje podwójny zestaw nawiasów kwadratowych ponieważ wymaga ich nazwa spiranowa a ponadto nawiasy kwadratowe użyte są do zamknięcia lokantów należących do nazw składnika pierścieniowego (patrz P-16.5.2.2).

P-24.7 ROZGAŁĘZIONE POLISPIRANOWE UKŁADY PIERŚCIENI

Kiedy trzy lub więcej składników jest spiroskondensowane do innego pojedynczego składnika układ opisuje się jako rozgałęziony układ spiroskondensowany. Końcowe składniki mają tylko jeden atom spiro.

P-24.7.1 Kiedy centralny składnik pierścieniowy jest spiroskondensowany do trzech lub więcej końcowych składników pierścieniowych to najpierw wymienia się centralny składnik pierścieniowy a jego lokanty nie są primowane. Końcowe składniki pierścieniowe wymienia się z odpowiednimi zwielokrotniającymi przedrostkami (‘tris’, ‘tetrakis’, etc.) a ich lokanty są primowane , podwójnie primowane, etc., zgodnie z możliwie najniższymi lokantami atomów spiro centralnego składnika pierścieniowego. Atomy spiro wskazuje się parami lokantów oddzielonych dwukropkiem. Wskazany atom wodoru, jeśli to potrzebne, wymienia się przed odpowiednim przedrostkiem spiro.

Przykład:

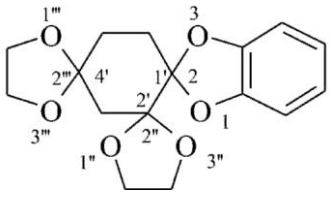


trispiro[1,3,5-tritiano-2,2′:4,2′′:6,2′′′-tris(bicyklo[2.2.1]heptan] (PIN)

P-24.7.2 Kiedy dwa lub więcej różnych końcowych składników pierścieniowych jest spiroskondensowanych z centralnym składnikiem to najpierw wymienia się alfabetycznie wcześniejszy składnik, jeśli potrzeba ze zwielokrotniającymi przedrostkami, następnie centralny pierścieniowy składnik, a potem, w alfabetycznym porządku, pozostały/pozostałe końcowe składniki pierścieniowe. Pierwszy wymieniany składnik pierścieniowy, lub jeden z pierwszych wymienianych składników pierścieniowych, jest spiroskondensowany w pozycji spiro centralnego składnika pierścieniowego o najniższej liczbie. Następnie najniższe lokanty przypisuje się pozostałym końcowym składnikom pierścieniowym zgodnie z ich alfabetycznym porządkiem (włączając, jeśli jest ich więcej niż jeden, pozostałe najpierw wymieniane składniki pierścieniowe).

Przykłady:

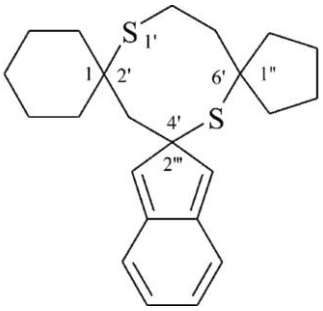
(1)



trispiro[[1,3]benzodioksolo-2,1′-cykloheksano-2′,2′′:4′,2′′′bis([1,3]dioksolan)] (PIN)

Uwaga: W przytoczonej nazwie występuje podwójny zestaw nawiasów kwadratowych ponieważ wymaga ich nazwa spiranowa i są one również użyte do zamknięcia lokantów należących do nazw pierścieniowego składnika (patrz P-16.5.2.2).

(2)

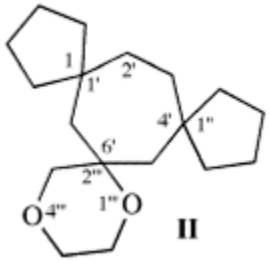


trispiro[cykloheksano-1,2′-[1,5]ditiokano-6′,1′′-cyklopentano-4′,2′′′-inden] (PIN)
(pierścień cykloheksanu musi być spiroskondensowany w pozycji '2'' ditiokanu, centralnego pierścieniowego składnika)

(3)

I

nie

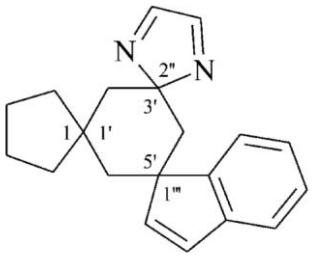


II

8,11-dioksatrispiro[4.1.5^{7}.1.4^{14}.2^{5}]ikozan (**I**) (PIN)
trispiro[bis(cyklopentano)-1,1′:4′,1′′-cykloheptano-6′,2′′′-[1,4]-dioksolan] (**II**)
{nie trispiro[bis(cyklopentano)-1,1′:5′,1′′-cykloheptano-3′,2′′′-[1,4]-dioksolan] }

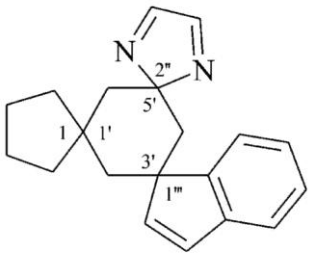
Wyjaśnienie: Pierwszy wymieniany pierścień cyklopentanu musi być przyłączony do pozycji o najniższym lokancie centralnego składnika pierścieniowego. Następnie najniższe lokanty przypisuje się innym składnikom pierścieniowym w porządku alfanumerycznym, zaczynając od drugiego pierścienia cyklopentanu, w przypadku którego 4′ jest niższe od 5′.

(4)



(I)

nie



(II)

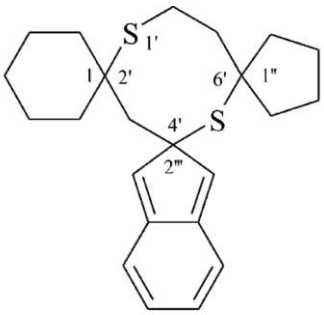
trispiro[cyklopentano-1,1′-cykloheksano-3′,2′′-imidazolo-5′,1′′′-inden] (**I**) (PIN)
{nie trispiro[cyklopentano-1,1′-cykloheksano-5′,2′′-imidazolo-3′,1′′′-inden] (**II**)}

Wyjaśnienie: Lokant ‘3′’ w (**I**) jest niższy od ‘5′’ w (**II**) dla pierwszego wymienianego pierścieniowego składnika po wymienieniu centralnego składnika pierścieniowego.

P-24.7.3 Jeżeli stosując się do P-24.7.2 nie można podjąć decyzji i nadal istnieje możliwość wyboru lokantów, wybiera się najniższy zestaw lokantów dla wszystkich atomów spiro, porównując

zespoły w rosnącym liczbowo porządku a jeśli to nie wystarcza uwzględnia się porządek ich wymieniania w nazwie. Jeżeli nadal pozostaje wybór, bierze się pod uwagę kryteria dotyczące heteroatomów i wskazanego atomu wodoru (patrz podrozdział SP-3.2 w ref. 8).

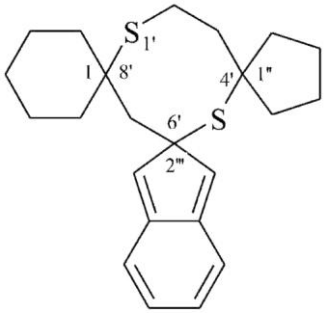
Przykłady:



(I)

poprawnie

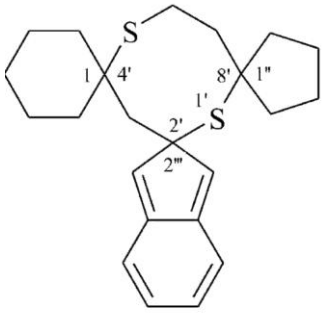
nie



(II)

niepoprawnie

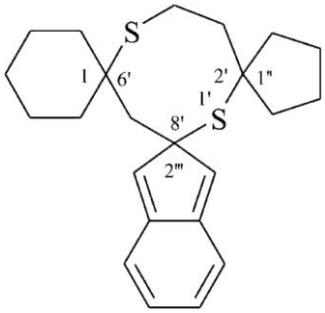
nie



(III)

niepoprawnie

nie



(IV)

niepoprawnie

trispiro[cykloheksano-1,2′-[1,5]ditiokano-6′,1′′-cyklopentano-4′,2′′′-inden] (**I**) (PIN)
{nie trispiro[cykloheksano-1,8′-[1,5]ditiokano-4′,1′′-cyklopentano-6′,2′′′-inden] (**II**);
nie trispiro[cykloheksano-1,4′-[1,5]ditiokano-8′,1′′-cyklopentano-2′,2′′′-inden] (**III**);
nie trispiro[cykloheksano-1,6′-[1,5]ditiokano-2′,1′′-cyklopentano-8′,2′′′-inden] (**IV**)}.

Wyjaśnienie: Zestaw lokantów ‘1,1′′,2′,2′′′,4′,6′’ w (**I**) jest niższy od ‘1,1′′,2′′′,4′,6′,8′’ w (**II**), ‘1,1′′,2′,2′′′,4′,8′’ w (**III**) i ‘1,1′′,2′,2′′′,6′,8′’ w (**IV**).

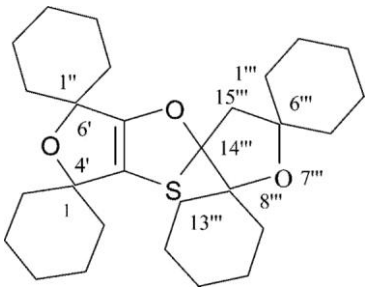
P-24.7.4 Jeżeli dodatkowe składniki są spiroskondensowane z rozgałęzionym polispiranowym związkiem, opisanym w P-24.7.1 do P-24.7.3, stosuje się kolejno następujące kryteria:

(a) Wszystkie monocykliczne składniki pierścieniowe spiroskondensowane razem, włączając, jeśli występują, przedrostki zamienne (‘a’) szkieletu nazywa się (P-24.2) jako jednostkę zawierającą maksymalną liczbę monocyklicznych składników pierścieniowych. Jednostka ta jest używana jako składnik do dalszego spiroskondensowania (patrz P-24.6). Dla ułatwienia wskazania złożonego charakteru nazwy używa się nawisów klamrowych (zamiast nawiasów kwadratowych) za początkowym przedrostkiem polispiro, do zamknięcia składników, z których co najmniej jeden jest już spiroskondensowany.

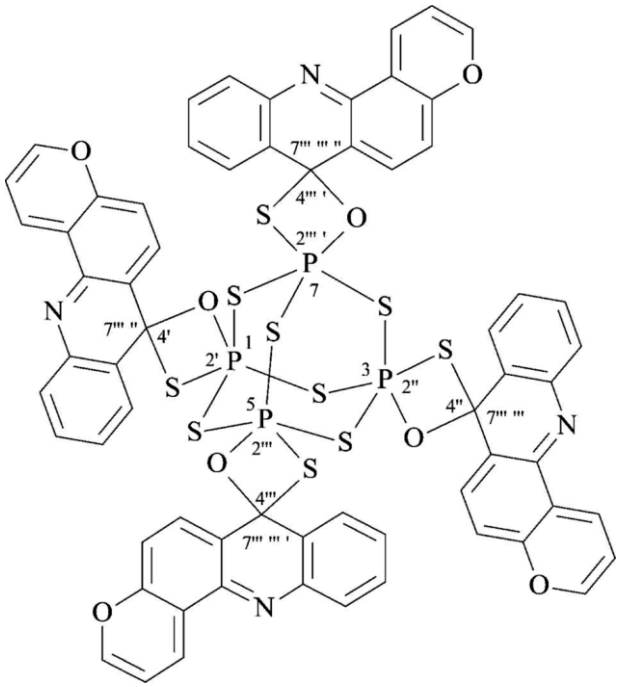
(b) Jeżeli nie jest to układ polispiranowy monocyklicznych składników pierścieniowych albo taki, który nie może być nazwany przez, opisane poprzednio, zwykłe spiroskondensowanie, jego nazwę tworzy się nazywając największy układ spiranowy, który traktuje się jako jednostkę do dalszego spiroskondensowania. Primowanie jednostki jest kontynuowane w pozostałej części nazwy.

P-24.7.4.1 Po określeniu spiroskondensowanych składników są one, razem z pozostałymi składnikami, traktowane w zwykły sposób.

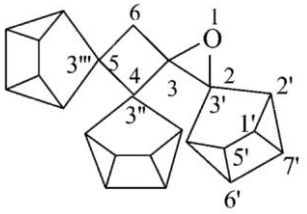
Przykłady:



trispiro[bis(cykloheksano)-1,4′:1′′,6′-furo[3,4-*d*][1,3]oksatiol-2′,14′′′-[7]oksadispiro[5.1.5^{8}.2^{6}]-pentadekan] (PIN);
pentaspiro[tetracykloheksano-1,2′(5′*H*):1′′′,5′:1′′′′,4′′(6′′*H*):1′′′′′,6′′-furano-3′(4′*H*),2′′-furo[3,4-*d*][1,3]oksatiol] (nazwa CAS)



1λ^{5},3λ^{5},5λ^{5},7λ^{5}-tetraspiro[tetraspiro[2,4,6,8,9,10-heksatia-1,3,5,7-tetrafosfaadamantano-1,2′:3,2′′:5,2′′′:7,2′′′ ′-tetrakis([1,3,2]oksatiafosfetano)-4′,7′′′ ′′,4′′,7′′′ ′′′:4′′′,7′′′ ′′′ ′,4′′′ ′,7′′′ ′′′ ′′-tetrakis(pirano[2,3-*c*]akrydyna)] [PIN, patrz SP-7.4(b) w ref. 8];
oktaspiro[2,4,6,8,9,10-heksatia-1,3,5,7-tetrafosfatricyklo[3.3.1.1^{3,7}]dekano-1,2′λ^{5}:3,2′′λ^{5}:5,2′′′λ^{5}:7,2′′′′λ^{5}-tetrakis[1,3,2]oksatiafosfetano-4′,7′′′ ′′:4′′,7′′′ ′′′:4′′′,7′′′ ′′′ ′:4′′′′,7′′′ ′′′ ′′-tetrakis[7*H*]pirano[2,3-*c*]akrydyna] (nazwa CAS)



trispiro[1-oksaspiro[2.3]heksano-2,3′:4,3′′:5,3′′′-tris(tetracyklo[3.2.0.0^{2,7}.0^{4,6}]heptan)] (PIN)

P-24.8 SPIRANOWE UKŁADY PIERŚCIENI ZAWIERAJĄCE ATOMY O NIESTANDARDOWEJ WIĄZALNOŚCI

Do rozpoznania heteroatomów o niestandardowej wiązalności stosuje się konwencję λ, charakteryzującą się symbolem λ^n (patrz P-14.1). Symbol ten jest umieszczany na początku kompletnej nazwy albo przed przedrostkiem zamiennym (‘a’) szkieletu atomu, do którego się odnosi.

P.24.8.1 Spiranowe układy pierścieni wyłącznie z monocyklicznymi składnikami pierścieniowymi

P-24.8.2 Monospiranowe układy pierścieni z dwoma identycznymi policyklicznymi składnikami pierścieniowymi

P-24.8.3 Spiranowe układy pierścieni z trzema identycznymi składnikami i z jednym niestandardowym atomem spiro

P-24.8.4 Monospiranowe układy pierścieni o różnych składnikach pierścieniowych, z których co najmniej jeden jest policyklicznym pierścieniem z niestandardowym atomem spiro

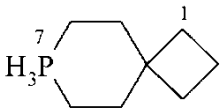
P-24.8.5 Nierozgałęzione polispiranowe układy pierścieni o różnych składnikach pierścieniowych, z których co najmniej jeden jest pierścieniem policyklicznym z przynajmniej jednym niestandardowym atomem spiro

P-24.8.6 Rozgałęzione spiranowe układy pierścieniowe z co najmniej jednym policyklicznym składnikiem pierścieniowym

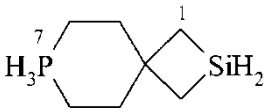
P.24.8.1 Spiranowe układy pierścieniowe wyłącznie z monocyklicznymi składnikami pierścieniowymi

P-24.8.1.1 Heteroatomom o niestandardowej wiązalności przypisuje się najniższe lokanty zgodnie z numeracją odpowiedniego spiranowego układu pierścieniowego.

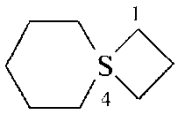
Przykłady:



7λ^5-fosfaspiro[3.5]nonan (PIN)



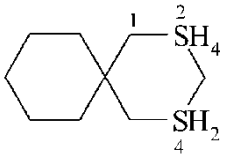
7λ^5-fosfa-2-silaspiro[3.5]nonan (PIN)



4λ^4-tiaspiro[3.5]nonan (PIN)

P-24.8.1.2 Jeżeli istnieje możliwość wyboru niższe lokanty przypisuje się heteroatomomo o wyższej wiązalności, na przykład, niższy lokant otrzymuje λ^6 heteroatom niż λ^4 heteroatom.

Przykład:

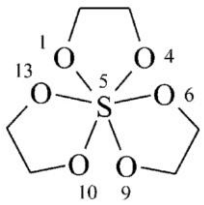


2λ^6,4λ^4-ditiaspiro[5.5]undekan (PIN)

P-24.8.1.3 Spiranowe układy pierścieniowe utworzone tylko z trzech monocyklicznych pierścieni i niestandardowego atomu spiro nazywa się przez rozszerzenie określonych w P-24.1, reguł nazywania spiranowych układów pierścieniowych.

P-24.8.1.3.1 Pierścieniowe układy składające się z trzech monocyklicznych pierścieni i jednego niestandardowego atomu spiro (na przykład atom spiro λ^6) nazywa się przez umieszczenie przedrostka ‘spiro’ przed nazwa odpowiadającą alicyklicznemu układowi pierścieniowemu z taką samą całkowitą liczbą atomów szkieletu jaką ma spiranowy układ pierścieniowy. Heteroatomy wskazuje się przedrostkami ‘a’, a niestandardową wiązalność symbolem ‘λ^n’ (patrz P-14.1). W spiranowym deskryptorze von Baeyera lokant atomu spiro występuje w indeksie górnym wskazując każdorazowo kolejne połączenie spiro.

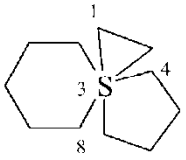
Przykład:



1,4,6,9,10,13-heksaoksa-5λ^6-tiaspiro[4.4^5.4^5]tridekan (PIN)

P-24.8.1.3.2 Jeżeli istnieje możliwość wyboru, mniejszy pierścień jest numeruje się przed większym.

Przykład:



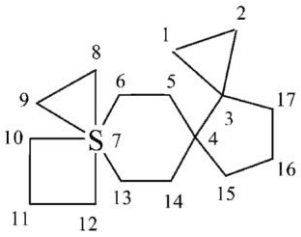
3λ^6-tiaspiro[2.4^3.5^3]dodekan (PIN)

P.24.8.1.4 Polispiranowe układy pierścieniowe, które zawierają co najmniej trzy pierścienie monocykliczne z jednym niestandardowym heteroatomem spiro oraz inne spiroskondensowania nazywa się przez rozszerzenie reguł nazewnictwa spiranowych układów pierścieniowych określonych w P-24.1. Nazwy tworzy się używając kombinacji metod nazywania polispiranowych

układów pierścieniowych i wskazanych atomów wodoru z niestandardową wiązalnością. Jeżeli istnieje możliwość wyboru numeracji, bierze się pod uwagę kolejno następujące kryteria, aż do podjęcia decyzji:

(a) Niskie liczby wybiera się dla atomów spiro;

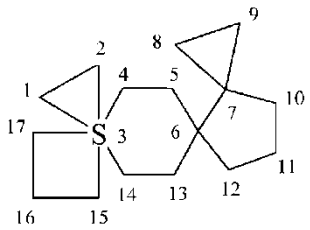
Przykład:



(I)

poprawnie

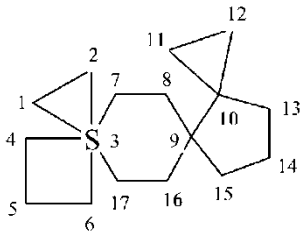
nie



(II)

niepoprawnie

nie



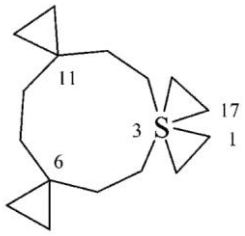
(III)

niepoprawnie

7λ^{6}-tiatrispiro[2.0.2.2^{7}.3^{7}.2^{4}.3^{3}]heptadekan (**I**) (PIN)
{nie 3λ^{6}-tiatrispiro[2.2.0.2^{7}.3^{6}.2^{3}.3^{3}]heptadekan (**II**);
nie 3λ^{6}-tiatrispiro[2.3.2.0.2^{10}.3^{9}.2^{3}]heptadekan (**III**)}

Wyjaśnienie: Zestaw lokantów atomów spiro w (**I**) ‘3,4,7’ jest niższy od ‘3,6,7’ w (**II**) lub ‘3,9,10’ w (**III**).

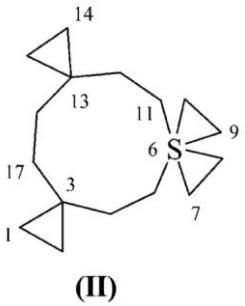
(b) Niskie liczby wybiera się dla atomów spiro łączących trzy pierścienie;
Przykład:



(I)

poprawnie

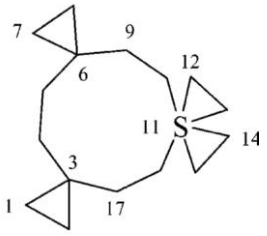
nie



(II)

niepoprawnie

nie



(III)

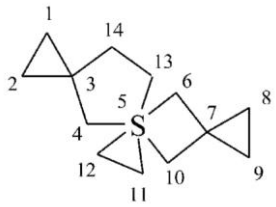
niepoprawnie

3λ^{6}-tiatrispiro[2.2.2^{6}.2.2^{11}.2^{3}.2^{3}]heptadekan (**I**) (PIN)
{nie 6λ^{6}-tiatrispiro[2.2.2^{6}.2^{6}.2.2^{13}.2^{3}]heptadekan (**II**);
nie 11λ^{6}-tiatrispiro[2.2.2^{6}.2.2^{11}.2^{11}.2^{3}]heptadekan (**III**)}

Wyjaśnienie: Lokant ‘3’ dla atomu spiro łączącego trzy pierścienie w (**I**) jest niższy od ‘6’ w (**II**) lub ‘11’ w (**III**).

(c) Niskie liczby wybiera się dla spirodeskryptorów von Baeyera w porządku wymieniania.

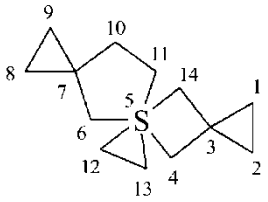
Przykład:



(I)

poprawnie

nie



(II)

niepoprawnie

5λ^6-tiatrispiro[2.1.1.2^7.1^5.2^5.2^3]tetradekan (**I**)
{nie 5λ^6-tiatrispiro[2.1.1.2^7.2^5.2^5.1^5]tetradekan (**II**)}

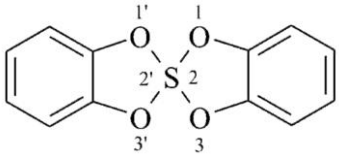
Wyjaśnienie: Zestaw spirodeskryptora '2,1,1,2,1,2,2' w (**I**) jest niższy od '2,1,1,2,2,2,1' w (**II**).

P-24.8.2 Monospiranowe układy pierścieniowe z dwoma identycznymi policyklicznymi składnikami pierścieniowymi

Symbol λ^n umieszcza się na początku pełnej nazwy utworzonej z nazw dwóch identycznych składników, układów pierścieniowych, włączając w ich nazwę heteroatomy. Symbol λ^n poprzedza najniższy lokant wskazujący atom spiro. Jeżeli potrzebne są wskazane atomy wodoru umieszcza się je przed symbolem λ. Jeżeli istnieje możliwość wyboru, wskazany atom wodoru otrzymuje lokant pierwszego wymienianego składnika.

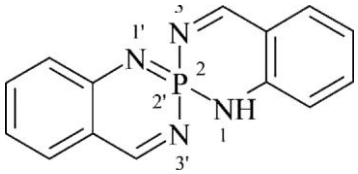
Uwaga: Do identyfikowania λ^n atomu spiro używa się ‘najniższego lokantu’ a nie ‘najmniej primowanego lokantu’ tak jak to było w SP-7 w ref. 8.

Przykłady:



2λ^4,2′-spirobi[[1,3,2]benzodioksatiol] (PIN)

Uwaga: W powyższej nazwie występuje podwójny zestaw kwadratowych nawiasów ponieważ wymaga ich nazwa spiranowa (patrz P-24.3.1) a także kwadratowe nawiasy są użyte do zamknięcia lokantów należących do nazw składnika pierścieniowego (patrz P-16.5.2.2).



1*H*-2λ^5,2′-spirobi[[1,3,2]benzodiazafosfinin] (PIN)

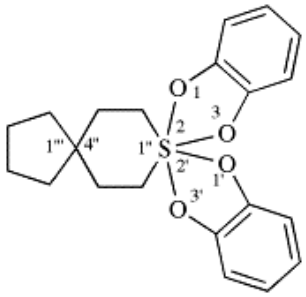
Uwaga: W powyższej nazwie występuje podwójny zestaw kwadratowych nawiasów

ponieważ wymaga ich nazwa spiranowa (patrz P-24.3.1) oraz zamknięcie lokantów należących do nazw pierścieniowego składnika (patrz P-16.5.2.2).

P-24.8.3 Spiranowe układy pierścieniowe z trzema identycznymi składnikami i z jednym niestandardowym atomem spiro

Układy pierścieniowe utworzone z trzech identycznych policyklicznych składników pierścieniowych i tylko jednego atomu spiro nazywa się umieszczając przedrostek ‘spiroter’przed, zamkniętą w kwadratowych nawiasach, nazwą składnika policyklicznego. Trzy spiranowe lokanty wymienia się na początku nazwy, a za nimi symbol λ z lokantem, który musi być najniższy spośród trzech wskazujących atom spiro.

Przykłady:



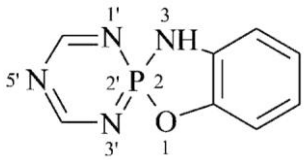
2λ^6,2′,2′′-spiroter[[1,3,2]benzodioksatiol] (PIN)

Uwaga: W powyższej nazwie występuje podwójny zestaw kwadratowych nawiasów ponieważ wymaga ich nazwa spiranowa (patrz P-24.3.1) a kwadratowe nawiasy użyte są też do zamknięcia lokantów należących do nazw pierścieniowego składnika (patrz P-16.5.2.2).

P-24.8.4 Monospiranowe układy pierścieniowe o różnych składnikach pierścieniowych, z których co najmniej jeden jest pierścieniem policyklicznym z niestandardowym atomem spiro

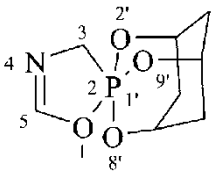
P-24.8.4.1 Monospiranowe układy pierścieniowe utworzone z dwóch układów pierścieniowych i heteroatomu spiro z niestandardową wiązalnością nazywa się umieszczając przedrostek spiro przed nazwami składników wymienianymi w porządku alfabetycznym, i odpowiednimi lokantami spiranowymi. Najniższy lokant (nie primowany) używany jest do wskazania spiroskondensowania a symbol λ jest umieszczany na początku nazwy. Wskazany atom wodoru, jeżeli to konieczne, dodaje się przed symbolem λ. Każdy dodatkowy atom o niestandardowej wiązalności traktowany jest jako część nazwy heterocykla, symbol λ wymienia się z najniższym lokantem wskazującym atom spiro.

Przykłady:



3*H*-2λ^5-spiro[[1,3,2]benzoksazafosfol-2,2′-[1,3,5,2]triazafosfinin] (PIN)

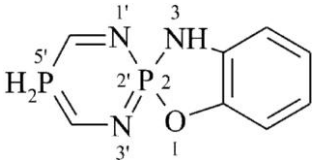
Uwaga: W powyższej nazwie występuje podwójny zestaw kwadratowych nawiasów ponieważ wymaga ich nazwa spiranowa (patrz P-24.3.1) a także potrzeba zamknięcia lokantów należących do nazw pierścieniowego składnika (patrz P-16.5.2.2).



3*H*-1λ^5-spiro[[1,4,2]oksazafosfol-2,1′-[2,8,9]trioksa[1]fosfaadamantan] (PIN)
3*H*-1λ^5-spiro[[1,4,2]oksazafosfol-2,1′-[2,8,9]trioksa[1]fosfatricyklo[3.3.1.1^{3,7}]dekan]

Uwaga 1: Adamantan jest nazwą zachowaną, preferowaną względem systematycznej nazwy von Baeyera

Uwaga 2: W powyższej nazwie występuje podwójny zestaw kwadratowych nawiasów ponieważ wymaga ich nazwa spiranowa (patrz P-24.3.1) oraz konieczość zamknięcia lokantów należących do nazw składnika pierścieniowego (patrz P-16.5.2.2).

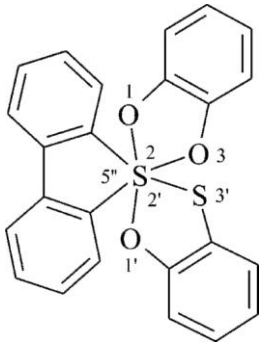


3*H*-2λ^5,5λ^5-spiro[[1,3,2]benzooksazafosfol-2,2′-[1,3,2,5]diazadifosfinin] (PIN)

Uwaga: W powyższej nazwie występuje podwójny zestaw kwadratowych nawiasów ponieważ wymaga ich nazwa spiranowa (patrz P-24.3.1) oraz zamknięcie lokantów należących do nazw składnika pierścieniowego (patrz P-16.5.2.2).

P-24.8.4.2 Kiedy obecne są trzy składniki pierścieniowe opisane dwoma różnymi oddzielnymi pierścieniami, żeby podkreślić tę nietypową sytuację, nazwę składnika pierścieniowego, który wymieniany jest jako drugi umieszcza się w nawiasach. Symbol λ^n, poprzedzony najniższym lokantem wskazujący atom spiro, umieszcza się na początku nazwy.

Przykład:

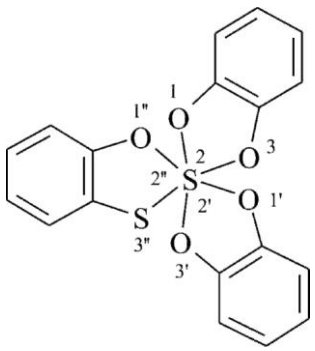


2λ^6-spiro[[1,3,2]benzodioksatiol-2,2′-([1,2,3]benzooksaditiol)-2,5′′-dibenzo[*b*,*d*]tiofen] (PIN)

Uwaga: W nazwie tej występuje podwójny zestaw kwadratowych nawiasów ponieważ wymaga ich nazwa spiranowa (patrz P-24.3.1) oraz potrzeba zamknięcia lokantów należących do nazw składnika pierścieniowego (patrz P-16.5.2.2).

P-24.8.4.3 Dwa identyczne składniki pierścieniowe wskazuje się przedrostkiem ‘bis’. Symbol λ^n, poprzedzony najniższym lokantem wskazujący atom spiro, umieszcza się na początku nazwy.

Przykład:



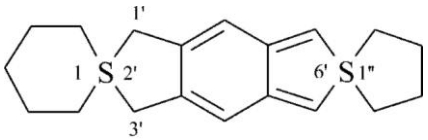
2λ^6-spiro[bis([1,3,2]benzodioksatiol)-2,2′′:2′,2′′-[1,2,3]benzooksaditiol] (PIN)

Uwaga: W powyższej nazwie występuje podwójny zestaw kwadratowych nawiasów ponieważ wymaga ich nazwa spiranowa (patrz P-24.3.1) oraz zamknięcie lokantów należących do nazw składnika pierścieniowego (patrz P-16.5.2.2).

P-24.8.5 Nierozgałęzione polispiranowe układy pierścieniowe o różnych składnikach pierścieniowych, z których co najmniej jeden jest układem policyklicznym z przynajmniej jednym niestandardowym atomem spiro

Nierozgałęzione polispiranowe układy pierścieniowe o różnych składnikach pierścieniowych, z których co najmniej jeden jest pierścieniem policyklicznym z przynajmniej jednym niestandardowym atomem spiro nazywa się używając metody opisanej w P-24.6. Symbol λ wskazujący spiranowe złącze związany jest z najniższym lokantem i umieszczany na początku nazwy, a jeśli zachodzi potrzeba, poprzedza go wskazany atom/atomy wodoru.

Przykład:

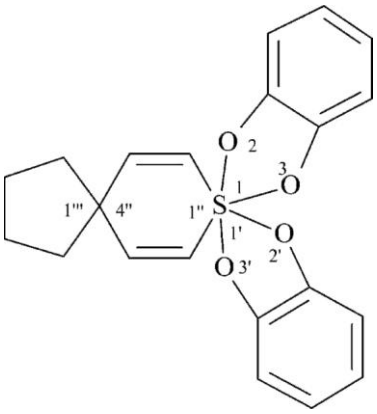


1′*H*,3′*H*,-1λ^4,1′′λ^4-dispiro[tian-1,2′-benzo[1,2-*c*:4,5-*c*′]ditiofeno-6′,1′′-tiolan] (PIN)

P-24.8.6 Rozgałęzione spiranowe układy pierścieniowe z co najmniej jednym policyklicznym składnikiem pierścieniowym

Jeżeli dwa lub więcej różnych końcowych składników pierścieniowych spiroskondensowanych jest z centralnym składnikiem pierścieniowym to najpierw wymienia się składnik najwcześniejszy alfabetycznie, jeśli to konieczne z liczbowym przedrostkiem, a następnie centralny składnik pierścieniowy i w porządku alfabetycznym, pozostałe końcowe składniki pierścieniowe. Symbol λ umieszcza się na początku kompletnej nazwy i wskazuje najniższym lokantem spiranowym, a jeśli zachodzi potrzeba poprzedza go wskazany atom wodoru.

Przykład:

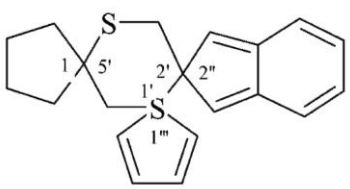


1′′λ^6-dispiro[bis([1,3,2]-benzodioksatiol)-2,1′′:2′,1′′-tiopirano-4′′,1′′′-cyklopentan] (PIN)

> **Uwaga:** W powyższej nazwie występuje podwójny zestaw nawiasów kwadratowych ponieważ wymaga ich nazwa spiranowa (patrz P-24.3.1) i oraz służą one do zamknięcia lokantów należących do nazw składnika pierścieniowego (patrz P-16.5.2.2).

Kiedy istnieje możliwość wyboru lokantów wybiera się najniższy zestaw lokantów dla atomów spiro, najpierw porównując je jako zespół w rosnącym liczbowo porządku, jeśli nadal nie ma rozstrzygnięcia w porządku wymieniania w nazwie. Jeśli nadal pozostaje wybór bierze się pod uwagę kryteria dotyczące heteroatomów i wskazanych atomów wodoru (patrz podrozdział SP-3.2 i SP-1.8 w ref. 8).

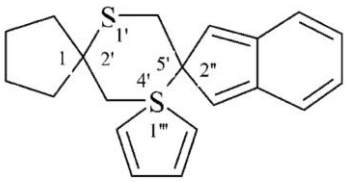
Przykład:



(I)

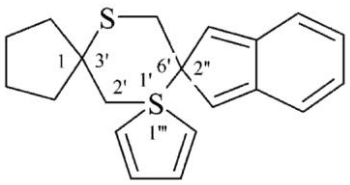
poprawnie

nie



(II)

niepoprawnie



(III)

niepoprawnie

1′λ^4-trispiro[cyklopentano-1,5′-[1,4]ditiano-2′,2″-indeno-1′,1‴-tiofen] (**I**) (PIN)
{nie 4′λ^4-trispiro[cyklopentano-1,2′-[1,4]ditiano-5′,2″-indeno-4′,1‴-tiofen] (**II**);
nie 1′λ^4-trispiro[cyklopentano-1,3′-[1,4]ditiano-6′,2″-indeno-1′,1‴-tiofen] (**III**) }.

Wyjaśnienie: Zestaw lokantów '1,1′,1‴,2′,2″,5'' w (**I**) jest niższy od '1,1‴,2′,2″,4′,5'' w (**II**) i '1,1,1‴,2″,3′,6'' w (**III**).

P-25 SKONDENSOWANE I MOSTKOWE SKONDENSOWANE UKŁADY PIERŚCIENI

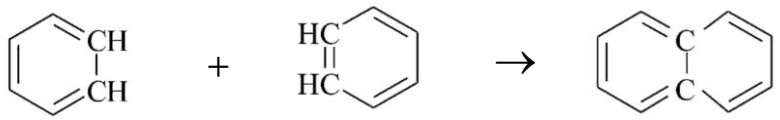
P.25.0 Wprowadzenie
P-25.1 Nazwy węglowodorowych macierzystych składników pierścieniowych
P-25.2 Nazwy heterocyklicznych macierzystych składników pierścieniowych
P-25.3 Tworzenie nazw skondensowanych
P-25.4 Mostkowe skondensowane układy pierścieniowe
P-25.5 Ograniczenia nomenklatury skondensowanej: trzy składniki razem *orto*- i *peri*-skondensowane
P-25.6 Skondensowane układy pierścieniowe z atomami szkieletu o niestandardowej wiązalności
P-25.7 Podwójne wiązania, wskazany atom wodoru i konwencja δ
P-25.8 Macierzyste składniki w porządku malejącego starszeństwa (lista częściowa)

P-25.0 WPROWADZENIE

Podrozdział ten opiera się na dokumencie zatytułowanym „Nomenclature of Fused and Bridged Fused Ring Systems , IUPAC Recommendations 1998 (ref. 4).

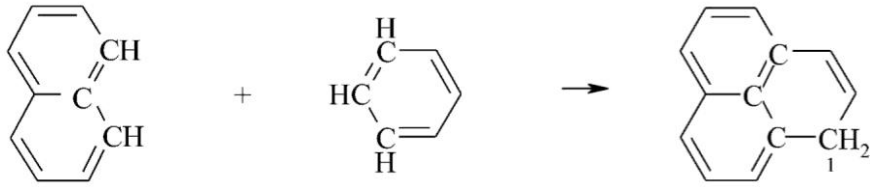
W nomenklaturze skondensowanie jest operacją, która tworzy wspólne wiązanie pomiędzy dwoma pierścieniami. Każdy pierścień dostarcza jedno wiązanie i dwa atomy bezpośrednio połączone z tym wiązaniem. Ten typ skondensowania nazywa się *orto* albo, jeśli zaangażowane są dwa sąsiadujące wiązania, *orto* i *peri*-skondensowanie. Położenia wspólne dla dwóch lub więcej pierścieni nazywa się pozycjami 'kątowymi'. Termin skondensowanie jest także używany do opisania operacji tworzenia wspólnego atomu pomiędzy dwoma pierścieniami albo układami pierścieniowymi, do którego każdy dostarcza jeden atom. Ten typ skondensowania nazywa się spiroskondensowanie (patrz P-24.1). Zwyczajowo, *orto*- oraz *orto*- i *peri*-skondensowanie były nazywane po prostu skondensowaniem i powstające policykliczne układy określano jako skondensowane układy pierścieni albo skondensowane związki pierścieniowe. Termin 'spiroskondensowanie' jest nowością w nomenklaturze, i żeby uniknąć dwuznaczności,

‘skondensowanie’ nie należy go używać bez przedrostka ‘spiro’ kiedy mowa o ‘spiroskondensowaniu’.



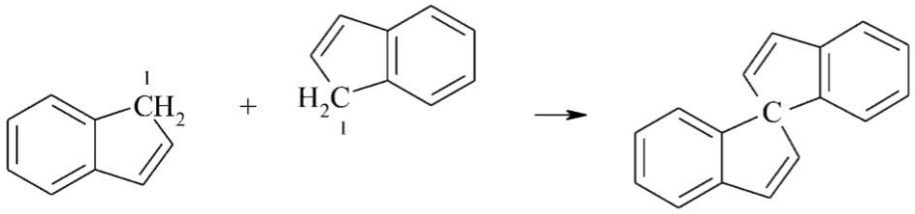
benzen (PIN) benzen (PIN) naftalen (PIN)

Wyjaśnienie: Skondensowanie (*orto*-skondensowanie) dwóch pierścieni benzenu daje naftalen (jedno wiązanie i dwa atomy są wspólne).



naftalen (PIN) benzen (PIN) 1*H*-fenalen (PIN)

Wyjaśnienie: 1*H*-fenalen jest wynikiem *orto*- oraz *orto*- i *peri*-skondensowania układu pierścieniowego naftalenu i pierścienia benzenu (dwa wiązania i dwa atomy wspólne).



1*H*-inden (PIN) 1*H*-inden (PIN) 1,1′-spirobi[inden] (PIN)

Wyjaśnienie: Spirobi[inden] powstaje w wyniku spiroskondensowania dwóch układów pierścieniowych indenu (jeden atom wspólny).

Ten podrozdział omawia skondensowane (*orto*- oraz *orto*- i *peri*-skondensowane) układy pierścieniowe i mostkowe skondensowane (*orto*- oraz *orto*- i *peri*-skondensowane) układy pierścieniowe. Spiroskondensowanie opisane jest w podrozdziale P-24. Celem tego podrozdziału jest tylko wprowadzenie do rozległego obszaru nomenklatury skondensowanej przedstawionym w dokumencie zatytułowanym „Nomenclature of Fused and Bridged Fused Ring Systems” (ref.4). W zasadach przedstawionych tutaj użyto raczej prostych przykładów. W przypadku bardziej złożonych układów pierścieniowych należy zajrzeć do wspomnianej powyżej publikacj albo do „*Ring Systems Handbook*” opublikowanej przez Chemical Abstracts Service (ref. 22). Zmiany w poprzednich regułach są zaznaczone.

P-25.1 NAZWY WĘGLOWODOROWYCH MACIERZYSTYCH SKŁADNIKÓW PIERŚCIENI

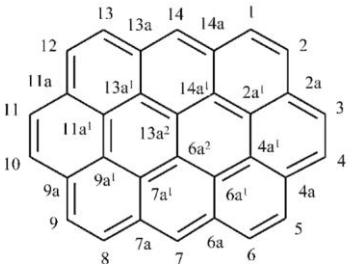
P-25.1.1 Zachowane nazwy węglowodorów używanych jako macierzyste składniki pierścieniowe i jako przyłączone składniki pierścieniowe

P-25.1.2 Systematycznie nazwane węglowodorowe składniki macierzyste

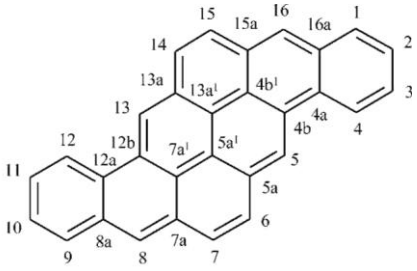
P-25.1.1 Zachowane nazwy węglowodorów używanych jako macierzyste składniki pierścieniowe i jako przyłączone składniki pierścieniowe

Zachowane nazwy (także określane jako nazwy zwyczajowe) węglowodorów policyklicznych są zebrane w Tabeli 2.7, w porządku malejącego starszeństwa wyboru jako składniki macierzyste w skondensowanej nomenklaturze. Ich pokazana numeracja jest wynikiem zastosowania określonych kryteriów, opisanych w podrozdziale P-25.3.3, stosowanych przy numeracji skondensowanych układów pierścieniowych.

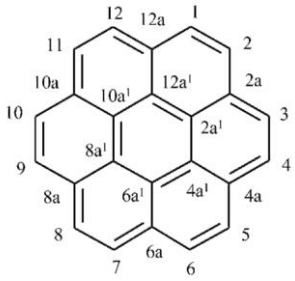
Tabela 2.7 Zachowane nazwy węglowodorowych macierzystych składników pierścieniowych w malejącym porządku starszeństwa
(porządek starszeństwa wskazuje liczba poprzedzająca nazwę; czym im niższa liczba tym wyższe starszeństwo)



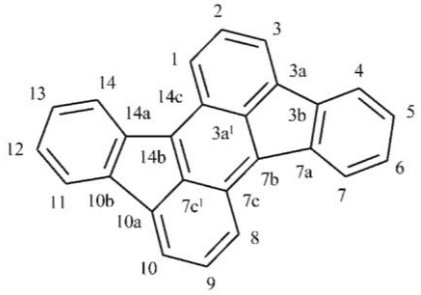
(1) owalen (PIN)



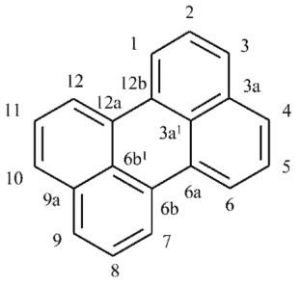
(2) pirantren (PIN)



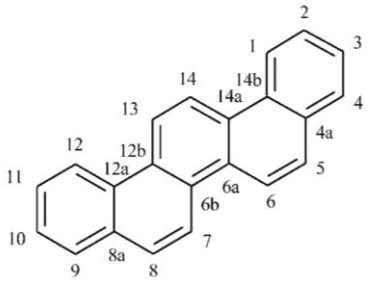
(3) koronen (PIN)



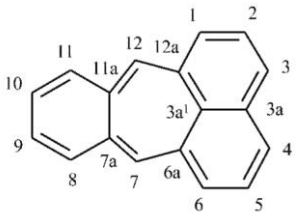
(4) rubicen (PIN)



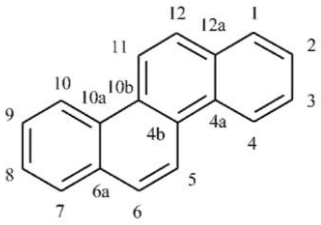
(5) perylen (PIN)



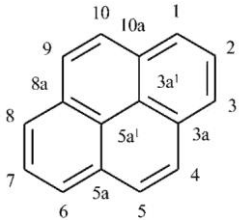
(6) picen (PIN)



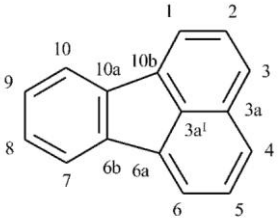
(7) plejaden (PIN)



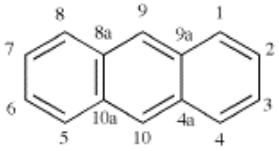
(8) chryzen (PIN)



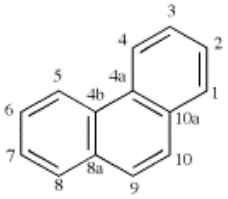
(9) piren (PIN)



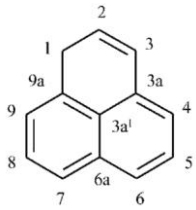
(10) fluoranten (PIN)



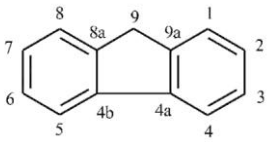
(11) antracen



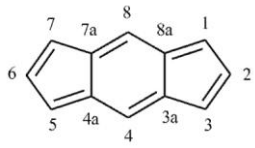
(12) fenantren



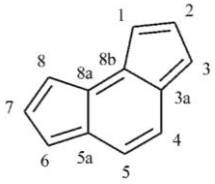
(13) fenalen
(pokazano izomer 1*H*;
PINem jest: 1*H*-fenalen)



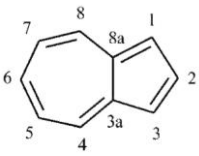
(14) fluoren
(pokazano izomer 9*H*;
PINem jest: 9*H*-fluoren)



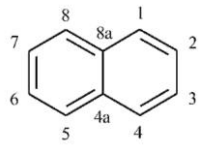
(15) *s*-indacen (PIN)



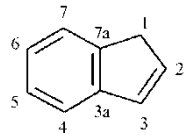
(16) *as*-indacen (PIN)



(17) azulen (PIN)



(18) naftalen (PIN)



(19) inden
(pokazano izomer 1*H*;
PIN: 1*H*-inden)

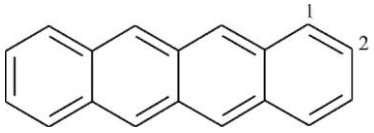
P-25.1.2 Systematycznie nazwane węglowodorowe składniki macierzyste

Nazwy niektórych węglowodorowych składników macierzystych mających maksymalną liczbę nieskumulowanych wiązań podwójnych (określanych jako układy pierścieniowe mancude) i mających dwa pierścienie zawierające pięć lub więcej członów w pierścieniu tworzy się systematycznie używając przedrostka i końcówki albo terminu przedstawiającego charakter i organizację składników pierścieniowych. Reguły numerowania są opisane w podrozdziale P-25.3.3.

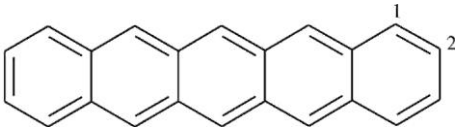
P-25.1.2.1 Poliaceny
P-25.1.2.2 Poliafeny
P-25.1.2.3 Polialeny
P-25.1.2.4 Polifenyleny
P-25.1.2.5 Polinaftaleny
P-25.1.2.6 Poliheliceny
P-25.1.2.7 Ace…yleny

P-25.1.2.1 Poliaceny. Węglowodorowy składnik macierzysty zawierający cztery lub więcej *orto*-skondensowanych, rozmieszczonych w prostej linii, pierścieni benzenu nazywa się wymieniając liczbowy przedrostek (‘tetra’, ‘penta’, etc.) wskazujący ich liczbę a za nim końcówkę ‘acen’ (pochodzącą z zachowanej nazwy antr**acen**) z pominięciem litery ‘a’.

Przykłady:



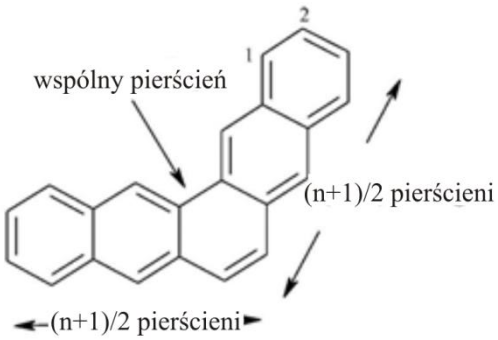
tetracen (PIN)
(poprzednio naftacen)



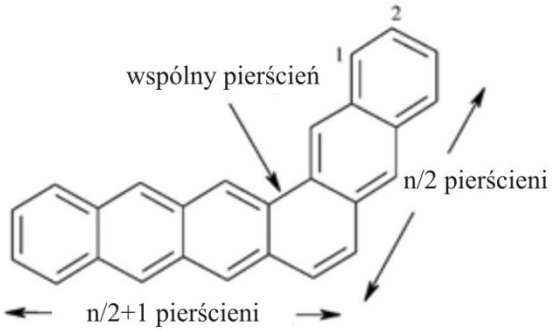
pentacen (PIN

P-25.1.2.2 Poliafeny. Węglowodorowy składnik macierzysty zawierający *n* *orto*-skondensowanych pierścieni ($n > 3$) benzenu rozmieszczonych w dwóch prostych rzędach mających $(n+1)/2$ pierścieni (jeżeli *n* jest nieparzyste) albo $n/2$ i $(n/2)+1$ pierścieni (jeżeli *n* jest parzysta) ze wspólnym pierścieniem benzenu i leżących formalnie pod kątem 120°. Poliafen nazywa się wymieniając liczbowy przedrostek (‘tetra’, ‘penta’, etc.) wskazujący całkowitą liczbę pierścieni benzenu a za nim końcówkę ‘fen’ (pochodzącą z zachowanej nazwy **fen**antren).

Przykłady:



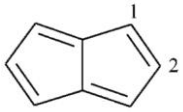
pentafen (*n* = 5) (PIN)



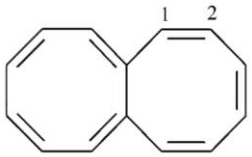
heksafen (*n* = 6) (PIN)

P-25.1.2.3 Polialeny. Węglowodorowy macierzysty składnik, zawierający dwa identyczne *orto*-skondensowane monocykliczne pierścienie węglowodorowe, nazywa się wymieniając przedrostek liczbowy (‘penta’, ‘hepta’, etc.), który oznacza liczbę atomów węgla w każdym pierścieniu a za nim końcówkę ‘alen’(pochodzącą z zachowanej nazwy naft**alen**) z pominięciem litery ‘a’.

Przykłady:



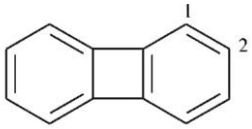
pentalen (PIN)



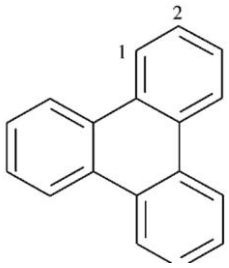
oktalen (PIN)

P-25.1.2.4 Polifenyleny. Węglowodorowy macierzysty składnik, zawierający monocykliczny węglowodór z parzystą liczbą atomów węgla i pierścienie benzenu *orto*-skondensowane do kolejnych na przemian boków, nazywa się wymieniając przedrostek liczbowy (‘tri’, ‘tetra’, etc.), który oznacza liczbę pierścieni benzenu a za nim termin ‘fenylen’. Zachowana jest tradycyjna nazwa bifenylen.

Przykłady:



bifenylen (PIN)
(nie difenylen)

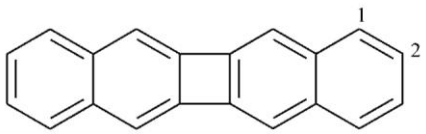


trifenylen (PIN)

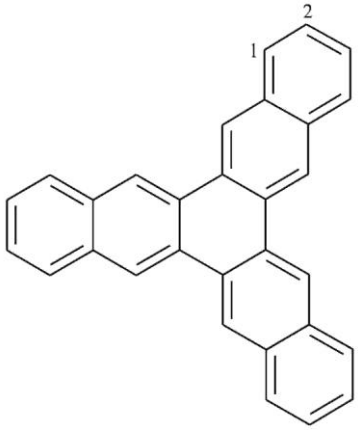
P-25.1.2.5 Polinaftyleny. Węglowodorowy macierzysty składnik, zawierający monocykliczny węglowodór z parzystą liczbą atomów węgla *orto*-skondensowany kolejnymi na przemian bokami do pozycji 2,3 pierścieni naftalenu, nazywa się wymieniając liczbowy przedrostek (‘tri’, 'tetra', etc.) określający liczbę pierścieni naftalenu a za nim termin 'naftylen'. Ta seria zaczyna się od trzech pierścieni naftalenu, trinaftylen; Pierwszy członek serii, którym byłby dinaftylen, jest nazywany jako

węglowodór skondensowany, to znaczy dibenzo [*b,h*]fenylen i nie jest traktowany jako macierzysty składnik.

Przykłady:



dibenzo[*b,h*]bifenylen (PIN)
(nie dinaftylen)

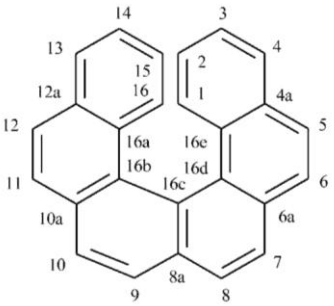


trinaftylen (PIN)

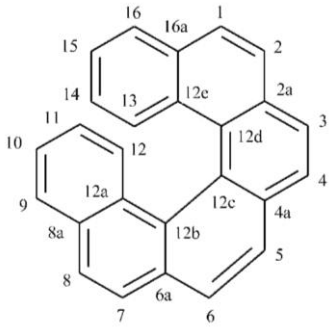
P-25.1.2.6 Poliheliceny. Węglowodorowy składnik macierzysty o sześciu lub więcej pierścieniach zawierający pierścień benzenu *orto*-skondensowany do pozycji 3,4 fenantrenu i w podobny sposób skondensowane dodatkowe pierścienie benzenu, nazywa się wymieniając przedrostek liczbowy (‘heksa’, ‘hepta’, etc.) oznaczający całkowitą liczbę pierścieni benzenu tworzących helikalne ułożenie, a za nim termin ‘helicen’.

> **Uwaga:** Definicja, orientacja i numerowanie polihelicenów zostało zmienione w dokumencie wyczerpująco opisującym nomenklaturę pierścieni skondensowanych „Nomenclature of Fused and Bridged Fused Ring Systemc” (ref. 4). Seria zaczyna się od sześciu pierścieni, a nie pięciu jak wskazywano w Przewodniku z 1993 roku (R-2.4.1.3.6 w ref. 2) i w „Glossary of Class Names (ref. 23). Nowa orientacja i numerowanie są przedstawione w podrozdziale P-25.3.3.1.1.

Przykład:



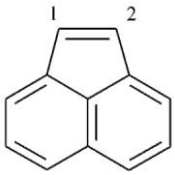
heksahelicen (PIN)
(nowa orientacja i numerowanie)



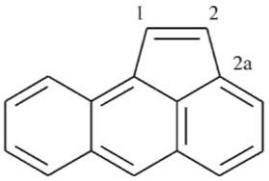
Uwaga: Nie zalecana już orientacja i numerowanie ale nadal stosowana w CAS dla układów pierścieniowych mających nazwę fenantro[3,4]fenantren (ref. 1)

25.1.2.7 Ace….yleny. Węglowodorowe składniki macierzyste, zawierające pięcioczłonowy pierścień *orto*- oraz *orto*- i *peri*-skondensowany do naftalenu, antracenu lub fenantrenu, nazywa się dodając przedrostek ‘ace’ do zachowanej nazwy i zamieniając, odpowiednio, końcówki ‘alen’, ‘acen’ lub ‘en’ na ‘ylen’.

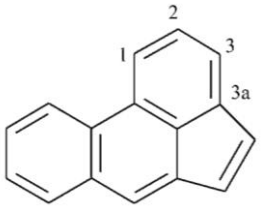
Przykład:



acenaftylen (PIN)



aceantrylen (PIN)



acefenantrylen (PIN)

P-25.2 NAZWY HETEROCYKLICZNYCH MACIERZYSTYCH SKŁADNIKÓW PIERŚCIENI

P-25.2.1 Zachowane nazwy używane dla macierzystych składników i jako składniki przyłączone

P-25.2.2 Nazwy tworzone systematycznie z końcówkami i przedrostkami używanymi dla składników macierzystych i składników przyłączonych.

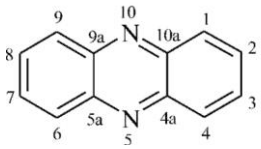
P-25.2.1 Zachowane nazwy heterocykli (określane także jako zwyczajowe) z maksymalną liczbą nieskumulowanych wiązań podwójnych (nazywanych układami pierścieniowymi mancude) używane do tworzenia nazw składników macierzystych i przyłączonych składników są podane w Tabeli 2.8.

Układy pierścieniowe zostały uporządkowane w malejącym porządku starszeństwa macierzystych związków zgodnie z porządkiem starszeństwa opisanym w podrozdziale P-25.3.2.4 i zilustrowanym w podrozdziale P-25.3.3.

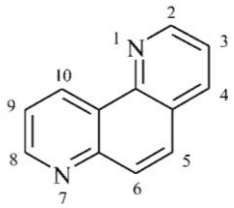
Nomenklatura zamienna (‘a’) szkieletu (patrz P-15.4), opisana w podrozdziale P-25.5.4, używana jest do zamiany atomu O na atomy S, Se i Te w chromenie [1-benzopiran (PIN)], izochromenie [2-benzopiran (PIN)] i ksantenie (PIN) oraz do utworzenia nazw chalkogenowych analogów tych układów pierścieniowych (patrz Tabela 2.8). Niektóre nazwy podane w Tabeli 2.8 mogą być modyfikowane przez system zamiany szczególny dla niektórych związków azotowych, w których N jest zamieniany na As lub P. Nazwy zmodyfikowane podano w Tabeli 2.9, a związki zdolne do modyfikacji są zaznaczone symbolem * w Tabeli 2.8. Reguły numerowania zostały opisane w podrozdziale P-25.3.3.

Tabela 2.8 Zachowane nazwy heterocyklicznych macierzystych składników w malejącym porządku starszeństwa

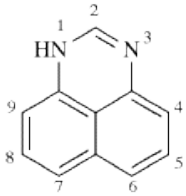
(porządek starszeństwa wskazuje liczba poprzedzająca nazwę; czym niższa liczba tym wyższe starszeństwo. Nazwy zaznaczone symbolem * modyfikuje się dalej w sposób pokazany w Tabeli 2.9)



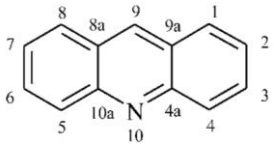
(1) fenazyna (PIN)



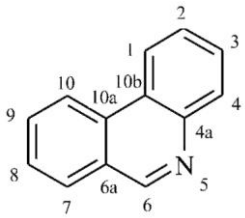
(2) fenantrolina (PIN)
(pokazano izomer 1,7, PIN: 1,7-fenantrolina; inne izomery: 1,8-, 1,9-, 1,10-, 2,7-, 2,8-, 2,9-, 3,7-, 3,8-, 4,7-)



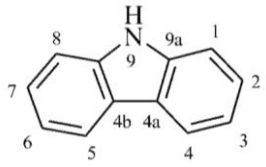
(3) perimidina
(pokazano izomer 1*H*; PINem jest 1*H*-perimidina)



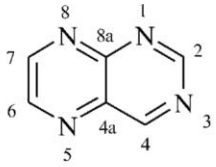
(4) akrydyna* (PIN)
(specjalna numeracja)



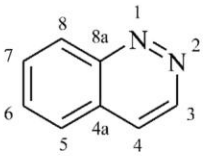
(5) fenantrydyna* (PIN)



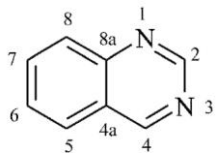
(6) karbazol (PIN)
(specjalna numeracja, pokazano izomer 9*H*: PINem jest 9*H*-karbazol)



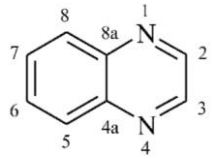
(7) pterydyna (PIN)



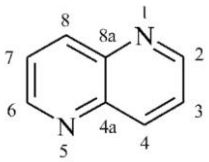
(8) cynnolina (PIN)



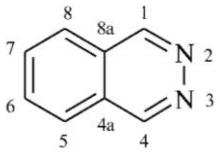
(9) chinazolina (PIN)



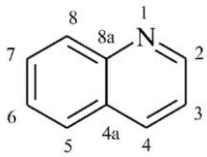
(10) chinoksalina (PIN)



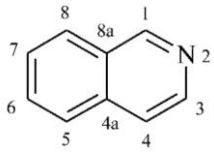
(11) naftyrydyna
(pokazano izomer 1,5; PINem jest: 1,5-naftyrydyna; inne izomery to: 1,6-, 1,7-, 1,8-, 2,6-, 2,7-)



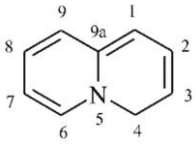
(12) ftalazyna (PIN)



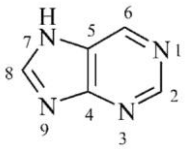
(13) chinolina*† (PIN)



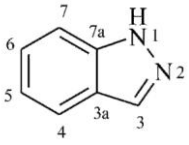
(14) izochinolina*† (PIN)



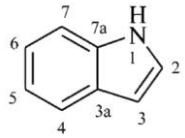
(15) chinolizyna †(PIN)
(pokazano izomer 4*H*; PINem jest: 4*H*-chinolizyna)



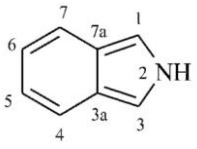
(16) puryna
(specjalna numeracja; pokazano izomer 7*H*; PINem jest: 7*H*-puryna)



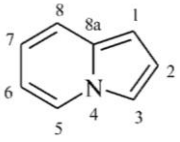
(17) indazol
(pokazano izomer 1*H*; PINem jest: 1*H*-indazol)



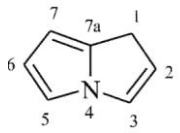
(18) indol*
(pokazano izomer 1*H*; PINem jest: 1*H*-indol)



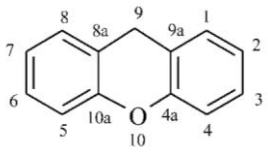
(19) izoindol*
(pokazano izomer 2*H*; PINem jest: 2*H*-izoindol)



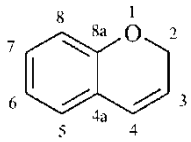
(20) indolizyna* (PIN)



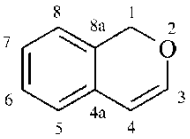
(21) pirolizyna
(pokazano izomer 1*H*;
PINem jest: 1*H*-pirolizyna)



(22) ksanten
(specjalna numeracja; pokazano izomer 9*H*;
PINem jest 9*H*-ksanten)
tioksanten (S zamiast O)
(specjalna numeracja; pokazano izomer 9*H*;
PINem jest: 9*H*-tioksanten)
selenoksanten (Se zamiast O)
(specjalna numeracja; pokazano izomer 9*H*;
PINem jest: 9*H*-selenoksanten)
telluroksanten (Te zamiast O)
(specjalna numeracja; pokazano izomer 9*H*;
PINem jest: 9*H*-telluroksanten)



(23) chromen
(pokazano izomer 2*H*)
1-benzopiran
(pokazano izomer 2*H*; PINem jest :
2*H*-1-benzopiran)



(24) izochromen
(pokazano izomer 1*H*)
2-benzopiran
(pokazano izomer 1*H*; PIN: 1*H*-2-benzopiran)

tiochromen (S zamiast O) (pokazano izomer 2*H*)
1-benzotiopiran (S zamiast O)
(pokazano izomer 2*H*; PINem jest:
2*H*-1-benzopiran)

izotiochromen (S zamiast O) (pokazano izomer 1*H*)
2-benzotiopiran (S zamiast O)
(pokazano izomer 1*H*; PINem jest:
1*H*-2-benzotiopiran)

selenochromen (Se zamiast O)
(pokazano izomer 2*H*)
1-benzoselenopiran (Se zamiast O) (pokazano
izomer 2*H*; PINem jest: 2*H*-1-benzoselenopiran)

izoselenochromen (Se zamiast O)
(pokazano izomer 1*H*)
2-benzoselenopiran (Se zamiast O)
(pokazano izomer 1*H*; PINem jest:
1*H*-2-benzoselenopirana)

tellurochromen (Te zamiast O)
(pokazano izomer 2*H*)
1-benzotelluropiran (Te zamiast O) (pokazano
izomer 2*H*; PINem jest: 2*H*-1-benzotelluropiran)

izotellurochromen (Te zamiast O)
(pokazano izomer 1*H*)
2-benzotelluropiran (Te zamiast O) (pokazano
izomer 1*H*; PINem jest: 1*H*-2-benzotelluropiran)

†W indeksowej nomenklaturze CAS chinolizyna wyprzedza w starszeństwie chinolinę i izochinolinę.

Tabela 2.9 Nazwy azotowych składników macierzystych zmodyfikowanych zamianą atomu azotu na atom fosforu lub arsenu

(Starszeństwo fosforowych i arsenowych układów pierścieniowych
podane jest w P-25.3.2.4 i P-25.8.1)
W pokazanych poniżej nazwach atomy arsenu lub fosforu zastępują atomy azotu

Azotowe układy pierścieniowe	Arsenowe układy pierścieniowe	Fosforowe układy pierścieniowe
akrydyna (PIN)	akrydarsyna (PIN)*	akrydofosfina (PIN)*
indol (PIN)	arsindol (PIN)	fosfindol (PIN)
indolizyna (PIN)	arsindolizyna (PIN)	fosfindolizyna (PIN)
izoindol (PIN)	izoarsindol (PIN)	izofosfindol (PIN)
izochinolina† (PIN)	izoarsynolina (PIN)	izofosfinolina (PIN)
fenantrydyna (PIN)	arsantrydyna (PIN)	fosfantrydyna (PIN)
chinolina† (PIN)	arsynolina (PIN)	fosfinolina (PIN)
chinolizyna† (PIN)	arsynolizyna (PIN)	fosfinolizyna (PIN)

*Numeracja systematyczna nie jak w akrydynie.
†W indeksowej nomenklaturze CAS chinolizyna wyprzedza chinolinę i izochinolinę

P-25.2.2 Systematycznie nazywane składniki heterocykliczne

P-25.2.2.1 Heteromonocykliczne składniki macierzyste
P-25.2.2.2 Składniki heterantrenowe
P-25.2.2.3 Składniki feno….in/yn/yna
P-25.2.2.4 Heteromonocykliczne składniki skondensowane z pierścieniem benzenu

P-25.2.2.1 Heteromonocykliczne składniki macierzyste

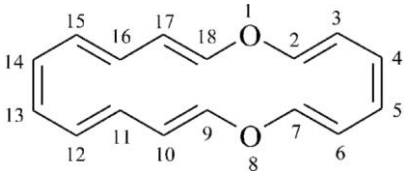
P-25.2.2.1.1 Heteromonocykliczne pierścienie z trzema do dziesięciu członami pierścieniowymi mające maksymalną liczbę nieskumulowanych wiązań podwójnych (określane jako układy pierścieniowe mancude) są używane jako składniki macierzyste oraz składniki przyłączone. Zachowane ich nazwy podano w Tablicy 2.2. Nazwy Hantzscha-Widmana są omawiane w P-22.2.2 .

P-25.2.2.1.2 W tym podrozdziale omawiane są nazwy heteromonocyklicznych macierzystych składników z więcej niż dziesięcioczłonowymi pierścieniami, używane w nomenklaturze skondensowanej. Są one używane wyłącznie w nomenklaturze skondensowanej (patrz także P-22.2.4). Preferowanymi nazwami IUPAC dla takich pierścieni są nazwy ‘polien’ (patrz P_22.2.4).

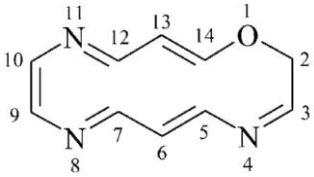
Heteromonocykliczne składniki macierzyste mające maksymalną liczbę nieskumulowanych wiązań podwójnych (układ pierścieni mancude) można nazywać przez zamianę końcówki ‘an’ w odpowiednim heteromonocyklu (patrz P-22.2.4) na ‘in’/‘yn’. Ich lokanty wymienia się na początku nazwy, za wskazanym atomem wodoru, jeśli taki występuje, w porządku pojawiania się w nazwie odpowiednich przedrostków zamiany (‘a’).

Przykłady skondensowanych związków, w tym ten typ heteromonocyklicznego składnika macierzystego podaje P-25.2.2.4.

Przykłady:



1,8-dioksacyklooktadecyn
1,8-dioksacyklooktadeka-2,4,6,9,11,13,15,17-oktaen (PIN)

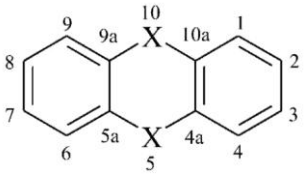


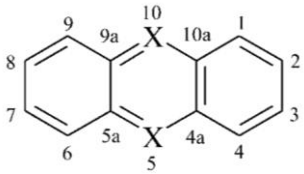
2*H*-1,4,8,11-oksatriazacyklotetradecyn
1-oksa-4,8,11-triazacyklotetradeka-3,5,7,9,11,13-heksaen (PIN)

P-25.2.2.2 Składniki heterantrenowe

Heterocykliczny składnik macierzysty, zawierający dwa pierścienie benzenu skondensowane z 1,4-dihetera-benzenem, w którym heteroatomy są takie same, nazywa się przez przyłączenie odpowiedniego przedrostka ‘a’ do końcówki ‘antren’ (pochodzącej z zachowanej nazwy antracen) z pominięciem litery ‘a’. Dopuszczalnymi heteroatomami są: O, S, Se, Te, P, As, Si i B. Kiedy hetroatomami są atomy azotu składnik nosi nazwę ‘fenazyna’ (nazwa zachowana). Jak pokazano, numeracja atomów jest standardowa. Reguły numeracji zostały opisane w podrozdziale P-25.3.3.

Przykłady:





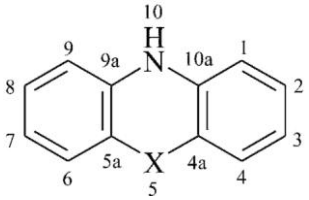
X = O oksantren (PIN)
dibenzo([1,4]dioksyn)
X = S tiantren (PIN)
X = Se selenantren (PIN)
X = Te tellurantren (PIN)
X = SiH silantren (PIN)

X = N fenazyna
(nazwa zachowana)
X = P fosfantren (PIN)
X = As arsantren (PIN)
X = B borantren (PIN)

P-25.2.2.3 Składniki feno….in/yn/yna

Heterocykliczny składnik macierzysty, zawierający dwa pierścienie benzenu skondensowane z 1,4-dihetera-benzenem, w którym heteroatomy są różne, nazywa się przez dodanie przedrostka ‘feno’ (pochodzącego od zachowanej nazwy fenantren) do odpowiedniej nazwy Hantzscha-Widmana (patrz P-22.2.2) usuwając ‘o’ przed samogłoską. Numerowanie atomów jest standardowe i zależy od rodzaju heteroatomów. Reguły numerowania są opisane w podrozdziale P-25.3.3.

Przykłady:

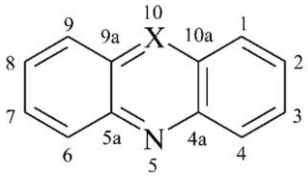


X = O fenoksazyna (pokazano izomer 10*H*; PIN: 10*H*-fenoksazyna)

X = S fenotiazyna (pokazano izomer 10*H*; PIN: 10*H*-fenotiazyna)

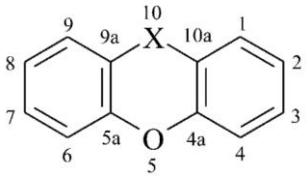
X = Se fenoselenazyna (pokazano izomer 10*H*; PIN: 10*H*-fenoselenazyna)

X = Te fenotellurazyna (pokazano izomer 10*H*; PIN: 10*H*-fenotellurazyna)



X = P fenazafosfinin (PIN)
fenofosfazyna (patrz refs. 2. 4)

X = As fenazarsynin (PIN)
fenarsazyna (patrz refs. 2, 4)



X = S fenoksatiin (PIN)

X = Se fenoksaselenin (PIN)

X = Te fenoksatelluryn (PIN)

X = PH fenoksafosfinin (PIN, pokazano izomer 10*H*)
fenoksafosfin (pokazano izomer 10*H*)

X = As fenoksarsynin (PIN, pokazano isomer 10*H*)
fenoksarsyn (pokazano izomer 10*H*)

X = SbH fenoksastybinin (PIN) (pokazano izomer 10*H*)
fenoksantymonin (pokazano izomer 10*H*)

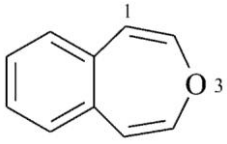
X = AsH i S zamiast O: fenotiarsynin (PIN, pokazano izomer 10*H*)
fenotiarsyn (pokazano izomer 10*H*)

P-25.2.2.4 Heteromonocykliczne składniki skondensowane z pierścieniem benzenu

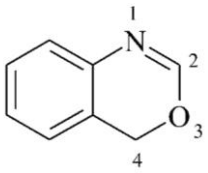
Skondensowane z pierścieniem benzenu pięcio- lub więcej członowe heteromonocykle (benzoheterocykle), jeśli nie są na liście zachowanych nazw w Tabeli 2.8 jak na przykład chinolina i cynnolina, nazywa się umieszczając lokant (lokanty) wskazujący pozycję (pozycje) heteroatomu (heteroatomów) przed nazwą zawierającą przedrostek skondensowania ‘benzo’ a za nim nazwę zachowaną albo systematyczną nazwę Hantzscha-Widmana albo nazwę utworzoną w nomenklaturze zamiennej (‘a’) szkieletu jak opisano w P-25.2.21.2. Wymieniane lokanty odnoszą się do całkowitej bicyklicznej struktury. Tak jak w nazwach Hantzscha-Widmana, lokanty umieszczane są w porządku odpowiadającym porządkowi wymieniania heteroatomów w heterocyklicznym składniku. Lokant ‘1’ jest zawsze przypisywany atomowi heterocyklicznego składnika sąsiadującemu z atomem skondensowania. Heteroatomom przpisuje się najniższe lokanty jako zespołowi bez względu na ich rodzaj. Jeżeli istnieje możliwość wyboru, najniższe lokanty przypisuje się zgodnie ze starszeństwem przedrostków ‘a’ (patrz Tabela 2.4). W ogólnej nomenklaturze, jeśli nazwa jest jednoznaczna, lokanty można pominąć. W preferowanych nazwach IUPAC lokanty musza być wymienione. Literę ‘o’ w przedrostku ‘benzo’ można pominąć jeśli po niej występuje samogłoska. Wskazany atom wodoru, jeśli jest obecny, umieszcza się na początku nazwy.

‘Nazwy benzo’ mają szereg zalet. Są prostsze ponieważ nie wymagają deskryptorów skondensowania. Jednakże główna ich zaleta leży w zastosowaniu jako składniki nazw skondensowanych; dostarczają dużą część struktury i usuwają jeden cały poziom lokantów przy tworzeniu nazw dla większych heterocyklicznych skondensowanych układów pierścieniowych.

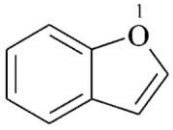
Przykłady:



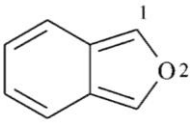
3-benzoksepin (PIN)
benzo[*d*]oksepin
3-benzooksepin



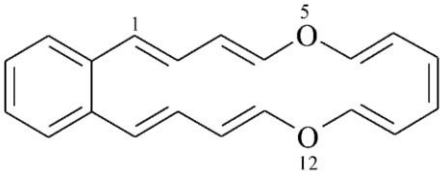
4*H*-3,1-benzoksazyna (PIN)
4*H*-benzo[*d*][1,3]oksazyna
4*H*-3,1-benzooksazyna



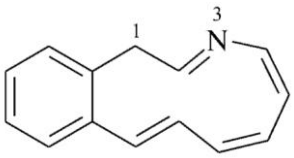
1-benzofuran (PIN)
benzofuran



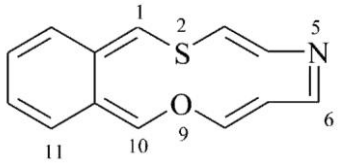
2-benzofuran (PIN)
izobenzofuran
benzo[*c*]furan



5,12-benzodioksacyklooktadecyn (PIN)
benzo[*m*][1,8]dioksacyklooktadecyn



1*H*-3-benzazacykloundecyn (PIN)
1*H*-benzo[*h*][1]azacykloundecyn
1*H*-3-benzoazacykloundecyn



9,2,5-benzoksatiaazacyklododecyn (PIN)
(nie 2,9,6-benzoksatiaazacyklododecyn;
zestaw lokantów 2,5,9 jest niższy od 2,6,9)
benzo[*j*][1,5,8]cyklooksatiaazadodecyn

P-25.3 TWORZENIE NAZW SKONDENSOWANYCH

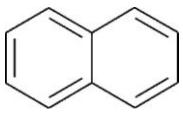
P-25.3.1 Definicje, terminologia i ogólne zasady
P-25.3.2 Tworzenie dwu-składnikowych nazw skondensowanych
P-25.3.3 Numerowanie skondensowanych układów pierścieniowych
P-25.3.4 Tworzenie wielo-składnikowych nazw skondensowanych
P-25.3.5 Heteromonocykle skondensowane z pierścieniem benzenu
P-25.3.6 Identyczne przyłączone składniki
P-25.3.6 Pomijanie lokantów w desktyptorach skondensowania

P-25.3.1 Definicje, terminologia i ogólne zasady

P-25.3.1.1 Definicje

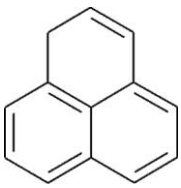
P-25.3.1.1.1 *orto*-Skondensowanie. Dwa pierścienie, które mają wspólne tylko dwa atomy i jedno wiązanie są *orto*-skondensowane.

Przykład:



Dwa pierścienie benzenu, pierścieniowego układu szkieletu naftalenu, są *orto*-skondensowane

P-25.3.1.1.2 *orto*- i *peri*-Skondensowanie. W związku policyklicznym pierścień *orto*-skondensowany do różnych boków dwóch innych pierścieni, które są ze sobą *orto*-skondensowane (to znaczy występują trzy wspólne atomy pomiędzy pierwszym pierścieniem i dwoma pozostałymi) określa się, że jest *orto*- i *peri*-skondensowany do tych dwóch pierścieni.



Szkielet fenalenu tworzą trzy pierścienie benzenu, każdy *orto*- i *peri*-skondensowany do dwóch pozostałych

P-25.3.1.1.3 Atom skondensowania. Każdy atom skondensowanego układu pierścieniowego, który jest wspólny dla dwóch lub więcej pierścieni.

P-25.3.1.1.4 Atom obwodowy. Każdy atom, który tworzy część zewnętrznego obwodu skondensowanego układu pierścieniowego.

P-25.3.1.1.5 Atom wewnętrzny. Każdy atom skondensowania, który nie jest atomem obwodowym.

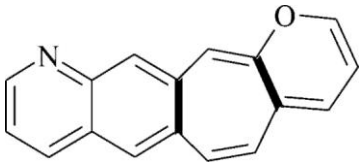
P-25.3.1.2 Terminologia

P-25.3.1.2.1 Składniki układu skondensowanych pierścieni. Składniki skondensowania są pierścieniami mancude albo układami pierścieni, które można nazwać bez stosowania nomenklatury skondensowanej. Układy pierścieni skondensowanych, które nie mają takich nazw nazywa się łącząc ze sobą nazwy odpowiednio wybranych składników skondensowania.

P-25.3.1.2.2 Składniki macierzyste. Składnik macierzysty według terminologii zaleceń z 1998 roku (ref. 4) [określany jako podstawowy składnik w publikacji z 1979 roku (ref. 1) i główny składnik w zaleceniach z 1993 roku (ref. 2)] jest składnikiem o najwyższym starszeństwie według kryteriów podanych w P-25.3.2.4. Macierzysty składnik może być monocykliczny lub policykliczny ale musi być pierścieniem mancude albo układem pierścieniowym mancude. Jego nazwa nigdy nie jest modyfikowana i wymienia się ją na końcu nazwy układu skondensowanego.

P-25.3.1.2.3 Przyłączony składnik. Składniki skondensowanego układu pierścieni nie należące do macierzystego składnika nazywa się składnikami przyłączonymi. Przyłączone składniki określa się jako pierwszego-rzędu, drugiego-rzędu etc. gdy odpowiadają pierwszemu, drugiemu, etc. przyłączonemu składnikowi osiąganemu w wyniku posuwania się od macierzystego składnika poprzez miejsca skondensowania. Składnik przyłączony może być mono- albo policykliczny, ale musi to być pierścień albo układ pierścieni. Miejsca skondensowania w przykładach poniżej są wytłuszczone.

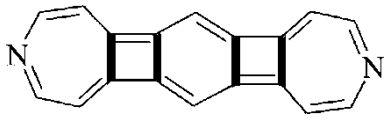
Przykład:



Wyjaśnienie: Bicykliczny składnik na lewym końcu przedstawionej struktury jest składnikiem macierzystym. Siedmioczłonowy pierścień skondensowany z macierzystym składnikiem jest przyłączonym składnikiem pierwszego rzędu. Sześcioczłonowy pierścień skondensowany z przyłączonym składnikiem pierwszego-rzędu jest przyłączonym składnikiem drugiego rzędu.

P-25.3.1.2.4 Składniki międzymacierzyste. W układzie składającym się z dwóch lub więcej macierzystych składników *orto*- lub *orto*- i *peri*-skondensowanych z tym samym przyłączonym składnikiem ten ostatni jest nazywany składnikiem międzymacierzystym. Podobnie, jeśli dwa (lub więcej) macierzystych składników jest skondensowanych z trzema lub więcej odpowiednio przyłączonymi składnikami pojawią się dwa pierwszego rzędu składniki międzymacierzyste i składnik międzymacierzysty drugiego rzędu. W bardziej złożonych układach mogą występować składniki czwartego, piątego etc. rzędu.

Przykład:



Wyjaśnienie: Dwa siedmioczłonowe pierścienie są składnikami macierzystymi; dwa czteroczłonowe pierścienie są składnikami międzymacierzystymi pierwszego rzędu; pierścień sześcioczłonowy jest składnikiem międzymacierzystym drugiego rzędu.

P-25.3.1.3 Ogólne zasady

orto-Skondensowane oraz *orto*- i *peri*-skondensowane policykliczne układy pierścieni z maksymalną liczbą nieskondensowanych wiązań podwójnych (mancude), nie mające przyjętej zachowanej nazwy lub nazwy systematycznej opisanej w podrozdziale P-25.1 i P-25.2, nazywa się umieszczając przed nazwą składnika pierścieniowego lub układu pierścieni (składnik macierzysty) określenie innego (innych) składnika (składników) (składniki przyłączone). Układy pierścieni skondensowanych w preferowanych nazwach IUPAC patrz P-52.2.4.

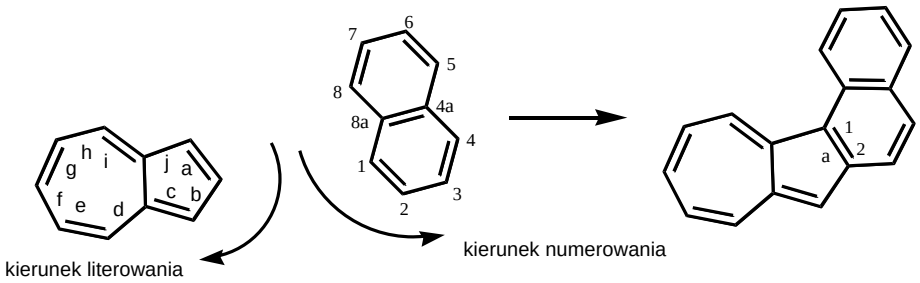
Macierzysty składnik wybiera się stosując kryteria starszeństwa opisane poniżej w P-25.3.2.4.W nazwie skondensowanej nazwa składnika macierzystego jest tożsama z jego nazwą. Nazwy przyłączonych składników są tworzone przez dodanie litery ‘o’ do nazwy składnika (na przykład ‘pirano’ z ‘piran’, ‘indeno’ z ‘inden’) lub w inny sposób opisany poniżej w P-25.3.2.2. Nie usuwa się końcowej litery ‘o’ lub ‘a’ przed samogłoską (patrz Reguła FR-4.7, odn. 4).

Lokanty opisujące cechy strukturalne składników, takie jak położenie heteroatomów, utrzymuje się z nazwą składnika i zamyka się je w kwadratowych nawiasach.

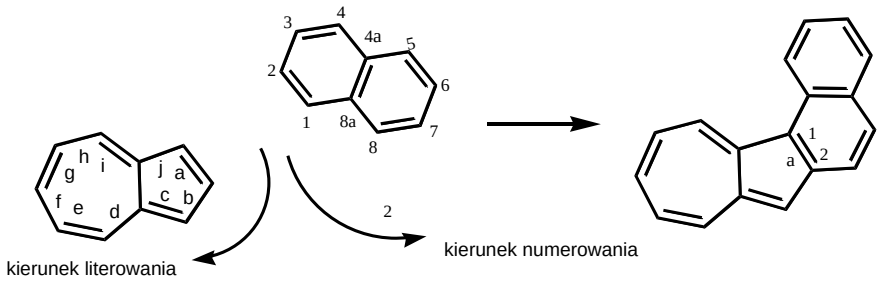
Uwaga: W preferowanych nazwach IUPAC pomijanie końcowej litery ‘o’ w ‘acenafto’, ‘benzo’, ‘nafto’ i ‘perylo’ oraz końcowej litery ‘a’ w monocyklicznych przedrostkach ‘cyklopropa’, ‘cyklobuta’, etc. nie jest zalecane, tak jak wskazano w FR-4.7 publikacji z 1998 roku (odn. 4). Tak że jest ‘benzo[*g*]izochinolina’ a nie ‘benz[*g*]izochinolina’. Jednakże ta elizja opisana w zaleceniach z 1979 roku (Reguły A-21.4, odn. 1) może być nadal stosowana w ogólnej nomenklaturze.

Izomery rozróżnia się przez umieszczenie liter w sposób ciągły na każdym obwodowym boku składnika macierzystego (włączając boki, których lokanty są wyróżnione literami, na przykład 2a,3a) używając liter pisanych kursywą *a, b, c*, etc., zaczynając od *a* dla boku o numeracji ‘1,2’, *b* dla ‘2,3’ etc. Przed literą możliwie wcześnie występującą w alfabecie, wskazującą bok, z którym nastąpiło skondensowanie, umieszcza się, jeśli jest taka potrzeba, liczby określające położenie przyłączenia drugiego składnika. Wybiera się możliwie niskie liczby zgodne z numeracją związku i ich porządek dostosowuje się do kierunku umieszczania liter w macierzystym składniku. W tym dokumencie te litery i liczby są umieszczone przy strukturach pierścieni lub układów pierścieni.

Przykład:



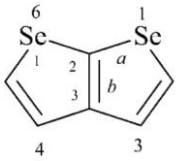
azulen (PIN) (macierzysty składnik) + naftalen (PIN) (przyłączony składnik) ⟶ naftaleno[1,2-*a*]azulen (PIN)



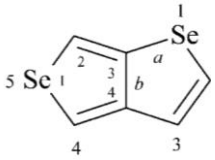
azulen (PIN) (macierzysty składnik) + naftalen (PIN) (przyłączony składnik) ⟶ naftaleno[2,1-*a*]azulen (PIN)

Cyfry i litery, jeśli to potrzebne, oddzielone przecinkami zamyka się w kwadratowych nawiasach i umieszcza bezpośrednio za określeniem dołączonego składnika; bez odstępu i myślnika przed i za nawiasami. Myślnik rozdziela dwie części deskryprora skondensowania, to znaczy, cyfry i litery. To wyrażenie definiuje tylko sposób skondensowania składników. Wskazane atomy wodoru, w miarę potrzeby, są dodawane do nazw z użyciem lokantów charakteryzujących układ skondensowany.

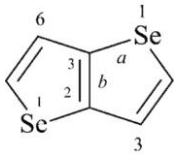
Przykład:



selenofeno[2,3-*b*]selenofen (PIN)



selenofeno[3,4-*b*]selenofen (PIN)

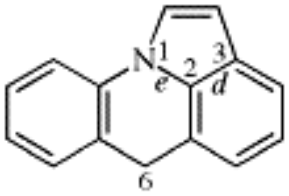


selenofeno[3,2-*b*]selenofen (PIN)

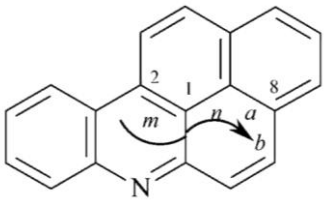
Dla układów pierścieni *orto*- i *peri*-skondensowanych potrzebne są deskryptory skondensowania wskazujące wszystkie skondensowane wiązania. Wymienia się wszystkie litery

odnoszące się do macierzystego składnika, ale wskazuje tylko lokanty atomów nieskondensowanych w przyłączonym składniku. Liter w deskryptorze skondensowania nie oddziela się przecinkami.

Przykłady:



6*H*-pirolo[3,2,1-*de*]akrydyna



nafto[2,1,8-*mna*]akrydyna

P-25.3.2 Tworzenie dwuskładnikowych nazw skondensowanych

Składniki mogą być monocykliczne lub policykliczne. Systematyczne tworzenie nazw przebiega krok po kroku w następujący sposób.

P-25.3.2.1 Wybór i nazywanie składników macierzystych dla nomenklatury skondensowanej
P-25.3.2.2 Przedrostki i przyłączone składniki
P-25.3.2.3 Orientacja układów pierścieni skondensowanych
P-25.3.2.4 Kryteria starszeństwa przy wyborze składnika macierzystego
P-25.3.2.5 Gromadzenie składników i nazywanie układów pierścieni skondensowanych

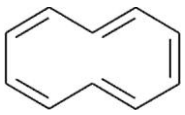
P-25.3.2.1 Wybór i nazywanie składników macierzystych dla nomenklatury skondensowanej

P-25.3.2.1.1 Węglowodory monocykliczne (annuleny)

Monocykliczne składniki macierzyste nazywa się jako [*n*]annuleny gdzie *n* oznacza liczbę atomów węgla. Seria zaczyna się od *n* = 7, ponieważ dla *n* = 6 preferowana jest zachowana nazwa ‘benzen’. Używanie nazwy ‘annulen’ zalecane było w Przewodniku z 1993 roku (patrz R-2.4.1.1, odn. 2) aby zapobiec potencjalnej dwuznaczności wynikającej z używania skróconych zwyczajowych nazw takich jak cyklohepten dla 1,3,5-cykloheptatrienu.

Przykłady:

1*H*-[7]annulen
(już nie cyklohepten jako składnik skondensowania)
cyklohepta-1,3,5-trien (PIN)



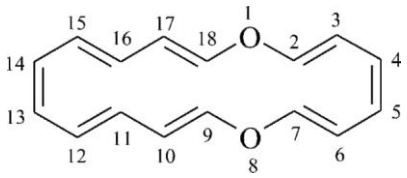
[10]annulen
(już nie cyklododecen jako składnik skondensowania)
cyklodeka-1,3,5,7,9-pentaen (PIN)

P-25.3.2.1.2 Heteromonocykle

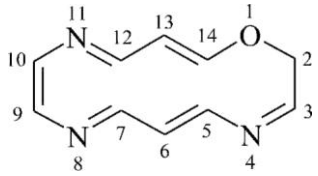
W nomenklaturze skondensowanej do określenia macierzystych składników używa się nazw podanych w Tabeli 2.2, za wyjątkiem ‘izotiazol’, ‘izooksazol’ i ‘oksazol’ oraz nazw Hantzscha-Widmana dla nienasyconych heteromonocyki (patrz P-22.2.2). Nazwy ‘izotiazol’, ‘izooksazol’, ‘tiazol’ i ‘oksazol’ chociaż dopuszczalne w ogólnej nomenklaturze, nie są zalecane do nazywania składników w preferowanych nazwach skondensowanych IUPAC. Należy używać nazw Hantzscha-Widmana, odpowiednio, 1,2-tiazol, 1,2-oksazol, 1,3-tiazol i 1,3-oksazol. W kompletnej nazwie skondensowanej lokanty zamyka się w nawiasach kwadratowych.

W preferowanych nazwach skondensowanych IUPAC jako składniki macierzyste używane są więcej niż dziesięcioczłonowe heteromonocykle o maksymalnej liczbie nieskumulowanych wiązań podwójnych, których nazwy oznacza się końcówką ‘in’ (‘yn’), opisane w P-25.2.2.1.2.

Przykłady:



1,8-dioksacyklooktadecyn
1,8-dioksacyklooktadeka-2,4,6,9,11,13,15,17-oktaen (PIN)



2*H*-1,4,8,11-oksatriazacyklotetradecyn
1-oksa-4,8,11-triazacyklotetradeka-3,5,7,9,11,13-heksaen (PIN)

P-25.3.2.1.3 W preferowanych nazwach skondensowanych IUPAC jako macierzyste składniki używane są nazwy węglowodorów i heterocykli opisane w podrozdziałach P-25.1.2 i P-25.2.2 oraz nazwy zachowane zebrane w Tablicach 2.2, 2.7 i 2.8.

P-25.3.2.2 Przedrostki dla przyłączonych składników

P-25.3.2.2.1 Przedrostki monocyklicznych węglowodorów dla przyłączonych składników, innych niż ‘benzo’, tworzy się pomijając literę ‘n’ w nazwie odpowiedniego nasyconego monocyklicznego węglowodoru. Utworzone nazwy przedstawiają struktury z maksymalną liczbą nieskumulowanych wiązań podwójnych. Ta zasada nie jest ograniczona wielkością.

Przykłady:

cyklopropa (preferowany przedrostek)
(z cyklopropanu, PIN)

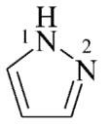
cyklobuta (preferowany przedrostek)
(z cyklobutanu, PIN)

cyklopenta (preferowany przedrostek)
(z cyklopentanu, PIN)

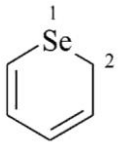
cyklohepta (preferowany przedrostek)
(z cykloheptanu (PIN)
(nie [7]annuleno)

cyklookta (preferowany przedrostek)
(z cyklooktanu, PIN)
(nie [8]annuleno)

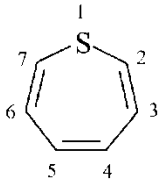
P-25.3.2.2.2 Przedrostki dla przyłączonych składników pochodzące z nazwy macierzystego składnika opisanego w P-25.3.2.1 i P-25.3.2.1.3 nazywa się przez dodanie na końcu litery ‘o’. Przykłady:



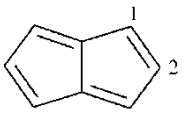
pirazolo(preferowany przedrostek)
(z pirazolu, PIN)



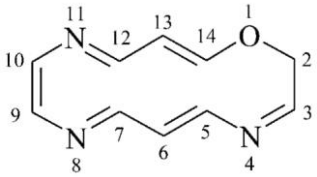
selenopirano (preferowany przedrostek)
(z selenopiran, PIN)



tiepino (preferowany przedrostek)
(z tiepin, PIN)



pentaleno (preferowany przedrostek)
(z pentalen, PIN)



1,4,8,11-oksatriazacyklotetradecyno
(preferowany przedrostek)
(z 1,4,8,11-oksatriazacyklotetradecyn, PIN)

P-25.3.2.2.3 Zachowane przedrostki

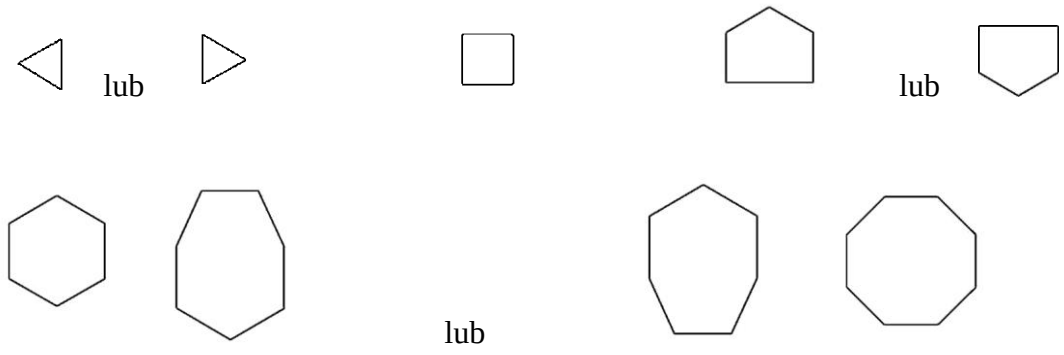
W preferowanych nazwach skondensowanych IUPAC zachowane zostały tylko wymienione poniżej skrócone przedrostki. Skrócone przedrostki acenafto, perylo, izochino i chino są zachowane, ale tylko do użycia w ogólnej nomenklaturze.

antra (preferowany przedrostek) (z antracen, PIN)	nafto (preferowany przedrostek) (z naftalen, PIN)	benzo (preferowany przedrostek) (z benzen, PIN)
fenantro (preferowany przedrostek) (z fenantren, PIN)	furo (preferowany przedrostek) (z furan, PIN)	imidazo (preferowany przedrostek) (z imidazol, PIN)
pirydo (preferowany przedrostek) (z pirydyna, PIN)	pirymido (preferowany przedrostek) (z pirymidyna, PIN)	tieno (preferowany przedrostek) (z tiofen, PIN)

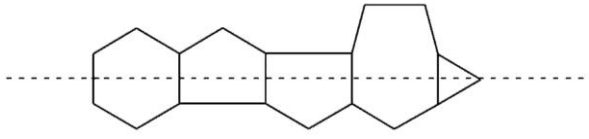
P-25.3.2.3 Orientacja układów pierścieni skondensowanych

P-25.3.2.3.1 Rysowanie struktur pierścieniowych

W celu wyboru składników macierzystych i numerowania układu pierścieni skondensowanych struktura związków o skondensowanych pierścieniach musi być rysowana w określony sposób, według zespołu kolejno stosowanych kryteriów, aż do osiągnięcia ostatecznej decyzji. Pojedyncze pierścienie policyklicznego '*orto*-skondensowanego' albo '*orto*- i *peri*-skondensowanego' węglowodorowego układu pierścieni rysuje się w taki sposób aby możliwie największa liczba różnych indywidualnych pierścieni znalazła się w poziomym szeregu. Takie szeregi charakteryzuje horyzontalna oś, która dzieli każdy pojedynczy pierścień na, w przybliżeniu, dwie połowy. Dopuszczalne kształty dla pierścieni od trzech- do ośmioczłonowych są następujące:



Przykład:



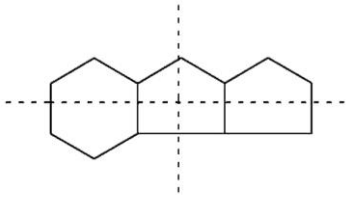
horyzontalny szereg i jego horyzontalna oś

P-25.3.2.3.2 Kryteria wyboru preferowanej orientacji

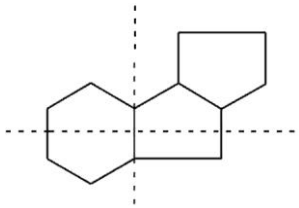
Policykliczne układy skondensowanych pierścieni orientuje się zgodnie następującymi kryteriami rozważanymi kolejno aż do osiągnięcia decyzji:

(a) maksymalna liczba pierścieni w poziomym szeregu;
Układ skondensowanych pierścieni jest rysuje się tak aby osiągnąć maksymalną liczbę *orto*-skondensowanych pierścieni, z pionowymi wspólnymi wiązaniami, w poziomym szeregu. Rysowane pionowe wiązania powinny być zawsze najbardziej od siebie oddalone. Jeżeli poprawna orientacja nie jest oczywista poziomy szereg dzieli się horyzontalna i pionową osią tworząc cztery kwadranty (ćwiartki). Pierścienie nie przepołowione przez horyzontalna oś nie należą do głównego szeregu i nie są brane pod uwagę przy liczeniu pierścieni w głównym szeregu.

Przykłady:



3 pierścienie w poziomym szeregu

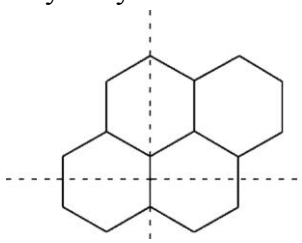


2 pierścienie w poziomym szeregu

Zgodnie z tym, przy tej samej liczbie pierścieni, poliaceny mają starszeństwo przed poliafenami i antracen ma starszeństwo przed fenantrenem.

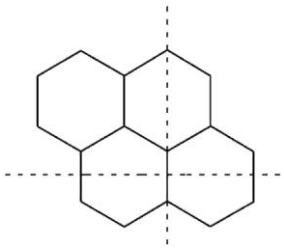
(b) W preferowanej orientacji maksymalna liczba pierścieni powinna znaleźć się powyżej i na prawo od poziomego szeregu (prawy górny kwadrant). W tym celu środek poziomego szeregu, jeśli jest w nim parzysta liczba pierścieni w szeregu, definiuje się jako centralne wspólne wiązanie, a jeśli liczba pierścieni jest nieparzysta jako środek środkowego pierścienia. Przy liczeniu pierścieni w kwadrancie te, które są przepołowione przez oś są traktowane jako dwie połowy, a pierścienie podzielone przez obie osie liczy się jako cztery ćwiartki (jedna w każdym kwadrancie). Pierścieni, które są przepołowione przez horyzontalną oś, ale nie są bezpośrednio *orto*-skondensowane z głównym szeregiem nie bierze się pod uwagę przy liczeniu pierścieni w poziomym szeregu

Przykłady:

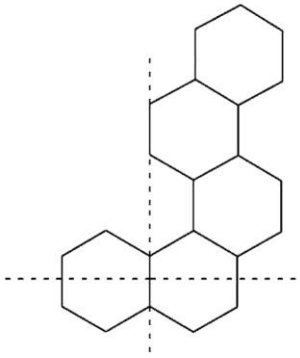


(poprawna orientacja)
2 pierścienie w poziomym szeregu
2 pierścienie w górnym prawym kwadrancie

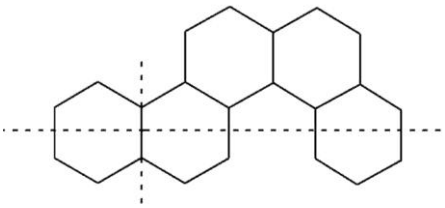
nie



(niepoprawna orientacja)
2 pierścienie w poziomym szeregu
1 pierścień w górnym prawym kwadrancie



nie



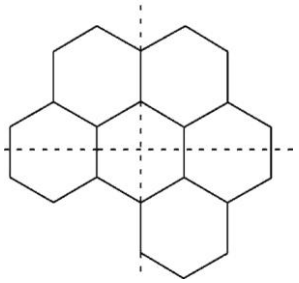
(poprawna orientacja)
2 pierścienie w poziomym szeregu
$3^1/_2$ pierścieni w górnym prawym kwadrancie

(niepoprawna orientacja)
2 (nie 3) pierścienie w poziomym szeregu
3 pierścienie w górnym prawym kwadrancie

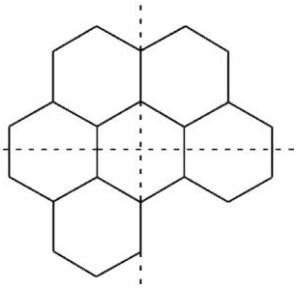
Zgodnie z tym, fenantren ($1^1/_2$ pierścienia w górnym prawym kwadrancie) jest starszy od fenalenu [1 pierścień (dwie $^1/_2$ pierścienia) w górnym prawym kwadrancie].

(c) minimalna liczba pierścieni w dolnym lewym kwadrancie.

Przykład:



nie

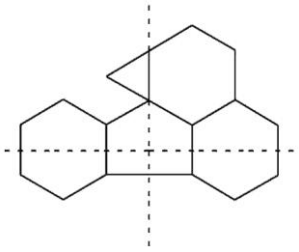


(poprawna orientacja)
3 pierścienie w poziomym szeregu
$1^3/_4$ pierścienia w górnym prawym kwadrancie
$^3/_4$ pierścienia w dolnym lewym kwadrancie

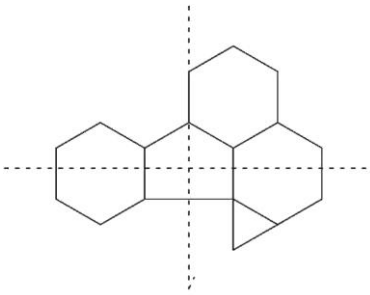
(niepoprawna orientacja)
3 pierścienie w poziomym szeregu
$1^3/_4$ pierścienia w górnym prawym kwadrancie
$1^3/_4$ pierścienia w dolnym lewym kwadrancie

(d) maksymalna liczba pierścieni powyżej poziomego szeregu

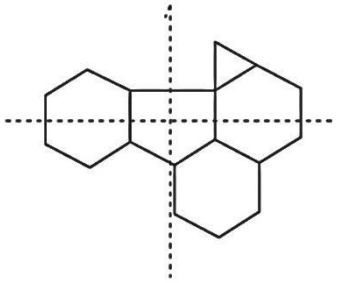
Przykłady:



(poprawna orientacja
3 pierścienie w poziomym szeregu
$1^{3}/_{4}$ pierścienia w górnym prawym kwadrancie
¾ pierścienia w dolnym lewym kwadrancie
$3^{1}{}_{2}$ pierścienia powyżej poziomego szeregu



(niepoprawna orientacja)
3 pierścienie w poziomym szeregu
$1^{3}/_{4}$ pierścienia w górnym prawym kwadrancie
¾ pierścienia w dolnym lewym kwadrancie
$2^{1}{}_{2}$ pierścienia powyżej poziomego szeregu



(niepoprawna orientacja)
3 pierścienie w poziomym szeregu
$1^{3}/_{4}$ pierścienia w górnym prawym kwadrancie
¾ pierścienia w dolnym lewym kwadrancie
$2^{1}/_{2}$ pierścienia powyżej poziomego szeregu

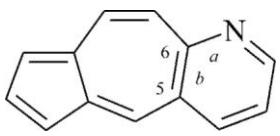
P-25.3.2.4 Kryteria starszeństwa przy wyborze składnika macierzystego

Składniki układu skondensowanych pierścieni wybiera się i nazywa według zasad przedstawionych w podrozdziałach P-25.3.2.1 i P-25.3.2.2. Gdy zachodzi potrzeba umiejscowienia cech nomenklaturowych takich jak wskazany atom wodoru albo atom z niestandardowa wiązalnością musi być użyty inny system lokantów, to znaczy, lokantów stosowanych do numerowania kompletnego układu pierścieni skondensowanych. W tych zaleceniach takie lokanty umieszcza się na zewnątrz struktury, tak jak pokazano w zachowanych nazwach w Tabelach 2.2, 2.7 i 2.8. Ten system jest wyczerpująco wyjaśniony i zilustrowany w P-25.3.3.

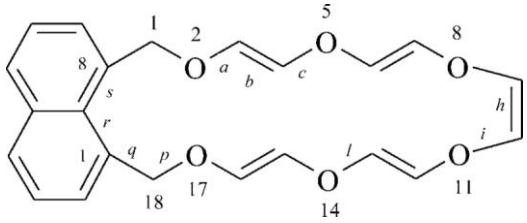
Jeżeli występuje możliwość wyboru przy wybieraniu składnika macierzystego, rozważa się kolejno następujące kryteria aż do osiągnięcia ostatecznego rozstrzygnięcia:

(a) składnik zawierający co najmniej jeden z heteroatomów występujący wcześniej w następującym porządku: N > F > Cl > Br > I > O > S > Se > Te > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al > Ga > In > Tl.

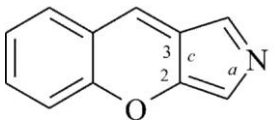
Przykłady:



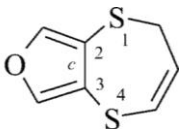
azuleno[6,5-*b*]pirydyna (PIN)
[pirydyna (heterocykl) jest starsza od azulenu (karbocykl)]



1*H*,18*H*-nafto[1,8-*rs*][1,4,7,10,13,16]heksaoksacyklohenikozyn (PIN)
[1,4,7,10,13,16-heksaoksacyklohenikozyn (heterocykl) jest starszy od naftalenu (karbocykl)]



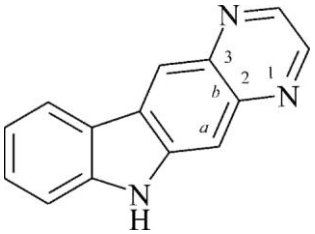
[1]benzopirano[2,3-*c*]pirol (PIN)
(pirol jest starszy od 1-benzopiranu; N > O)
chromeno[2,3-*c*]pirol



2*H*-[1,4]ditiepino[2,3-*c*]furan (PIN)
(furan jest starszy od ditiepinu; O > S)

(b) składnik zawierający więcej pierścieni;

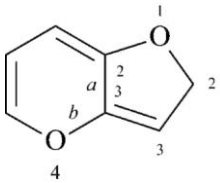
Przykład:



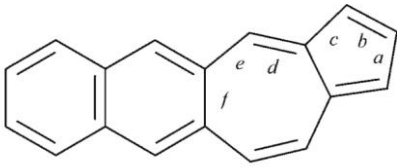
6*H*-pirazyno[2,3-*b*]karbazol (PIN)
[karbazol (3 pierścienie) jest starszy
od chinoksaliny (2 pierścienie)

(c) Składnik o największym pierścieniu w miejscu pierwszej różnicy przy porównywaniu pierścieni w porządku malejącej wielkości;

Przykłady:



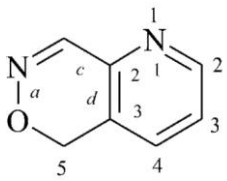
2*H*-furo[3,2-*b*]piran (PIN)
[piran (pierścień 6) preferowany
względem furanu (pierścień 5)]



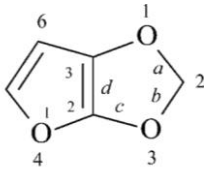
nafto[2,3-*f*]azulen (PIN)
[azulen (pierścienie 7, 5) preferowany
względem naftalenu (pierścienie 6, 6)]

(d) Składnik zawierający największą liczbę heteroatomów dowolnego rodzaju;

Przykłady:



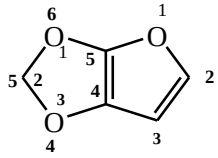
5*H*-pirydo[2,3-*d*][1,2]oksazyna (PIN)
[oksazyna (2 heteroatomy) preferowana względem pirydyny (1 heteroatom)]



2*H*-furo[2,3-*d*][1,3]dioksol (PIN)
[dioksol (2 heteroatomy) preferowany względem furanu (1 heteroatom)]

(e) Składnik zawierający większą różnorodność heteroatomów;

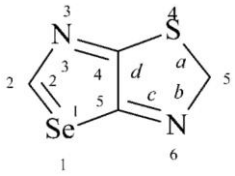
Przykład:



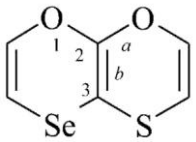
5*H*-[1,3]dioksolo[4,5-*d*][1,2]oksafosfol (PIN)
[1,3]dioksolo[*d*][1,2]oksafosfol
(atomy O i P preferowane względem dwóch atomów O)

(f) Składnik zawierający większą liczbę najstarszych heteroatomów biorąc pod uwagę porządek: F > Cl > Br > I > O > S > Se > Te > N > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al > Ga > In > Tl.

Przykłady:



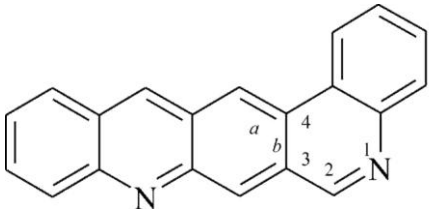
[1,3]selenazolo[5,4-*d*][1,3]tiazol (PIN)
(S, N starsze od Se, N)



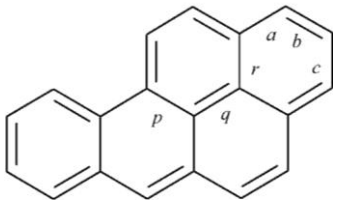
[1,4]oksaselenino[2,3-*b*][1,4]oksatiin (PIN)
(O, S starsze od O, Se)

(g) Składnik zawierający większa liczbę pierścieni w poziomym szeregu gdy jest narysowany w preferowanej orientacji podanej w P-25.3.2.3;

Przykłady:



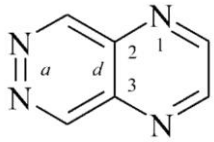
chinolino[4,3-*b*]akrydyna (PIN)
[akrydyna (3 pierścienie w poziomym szeregu) preferowana względem fenantrydyny (2 pierścienie w poziomym szeregu)]



benzo[*pqr*]tetrafen (PIN)
[tetrafen (3 pierścienie w poziomym szeregu) preferowany względem chryzenu lub pirenu (2 pierścienie w poziomym szeregu)]

(h) Składnik z niższymi lokantami heteroatomów;

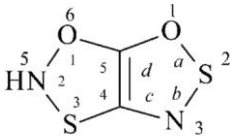
Przykład:



pirazyno[2,3-*d*]pirydazyna (PIN)
(lokanty ‘1,2’w pirydazynie preferowane względem lokantów ‘1,4’ w pirazynie)

(i) Składnik z niższymi lokantami dla heteroatomów branymi pod uwagę w porządku: F > Cl > Br > I > O > S > Se > Te > N > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al > Ga > In > Tl;

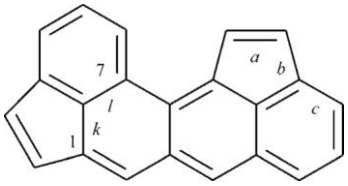
Przykład:



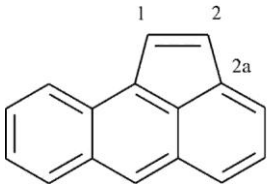
3*H*,5*H*-[1,3,2]oksatiazolo[4,5-*d*][1,2,3]oksatiazol (PIN)
(lokanty ‘1,2,3’ są niższe od ‘1,3,2’)

(j) Składnik z niższymi lokantami skondensowania obwodowych atomów węgla (numeracja skondensowania atomów węgla patrz P-25.3.3.1);

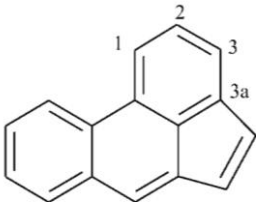
Przykłady:



dicyklopenta[*de,no*]tetrafen (PIN, patrz (c) powyżej)
indeno[1,7-*kl*]aceantrylen
(lokant 2a w aceantrylenie jest niższy od 3a w acefenantrylenie; patrz struktury poniżej)



aceantrylen (PIN)

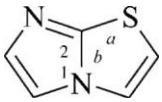


acefenantrylen (PIN)

P-25.3.2.5 Gromadzenie składników i nazywanie układów pierścieni skondensowanych. Przy gromadzeniu składników i nazywaniu układów pierścieni skondensowanych należy uuwzględnić również stosowanie następujących kryteriów.

P-25.3.2.5.1 Heteroatom wspólny dla dwóch składników powinien być wskazany w nazwie każdego składnika.

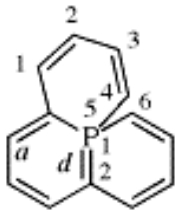
Przykład:



imidazo[2,1-*b*][1,3]tiazol (PIN)

P-25.3.2.5.2 Atom o niestandardowej wiązalności wskazuje się za pomocą konwencji ‘λ’ (lambda) (patrz P-14.1.3). Niestandardową wiązalność *n* wskazuje indeks górny symbolu λ, na przykład λ^5; symbol ten umieszcza się za lokantem atomu o niestandardowej wiązalności, zgodnie z numeracją skondensowanego układu i wymienia na początku nazwy układu pierścieni skondensowanych.

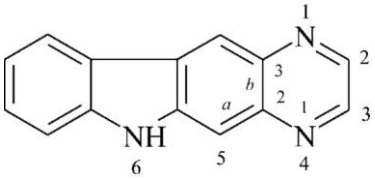
Przykład:



5λ^5-fosfinino[2,1-*d*]fosfinolizyn (PIN)

P-25.3.2.5.3 Wskazany atom wodoru, poprzedzony odpowiednimi lokantami układu pierścieni skondensowanych, wymienia się na początku nazwy.

Przykład:



6*H*-pirazyno[2,3-*b*]karbazol (PIN)

P-25.3.3 Numerowanie skondensowanych układów pierścieniowych

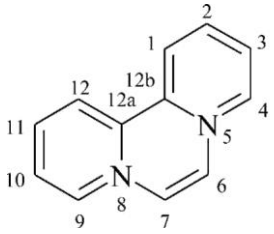
Systematyczne numerowanie układów skondensowanych pierścieni z zachowanymi nazwami, nazwami systematycznymi albo nazwami skondensowanymi przeprowadza się w ten sam sposób. Antracen, fenantren, akrydyna, karbazol, ksanten i jego chalkogenowe analogi, puryna i cyklopenta[*a*]fenantren są wyjątkami, dla których zachowana jest zwyczajowa (tradycyjna) numeracja. Rozważane będą dwa typy numeracji.

P-25.3.3.1 Numerowanie obwodowych atomów szkieletu
P-25.3.3.2 Numerowanie wewnętrznych heteroatomów
P-25.3.3.3 Numerowanie wewnętrznych atomów węgla

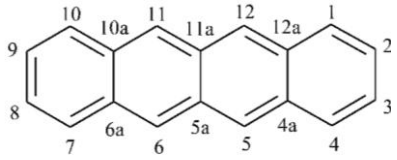
P-25.3.3.1 Numerowanie obwodowych atomów szkieletu

P-25.3.3.1.1 Numerowanie obwodowych atomów w preferowanej orientacji rozpoczyna się od najwyżej umieszczonego pierścienia. Jeżeli istnieje więcej niż jeden taki pierścień, wybiera się leżący bardziej na prawo. Numerowanie rozpoczyna się od nie-skondensowanego atomu w wybranym pierścieniu, oddalonym najdalej w kierunku przeciwnym do ruchu wskazówek zegara i kontynuuje w kierunku zgodnym z ruchem wskazówek wokół systemu, obejmując też heteroatomy na złączach pierścieni, ale nie atomy węgla na złączach. Każdy atom węgla na złączach otrzymuje taki sam numer jak najbliższy poprzedzający nieskondensowany atom szkieletu, modyfikowany literami ‘a’, ‘b’, ‘c’ itd.

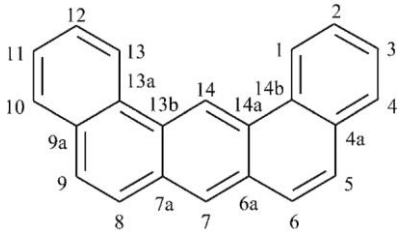
Przykłady:



dipirydo[1,2-*a*:2′,1′-*c*]pirazyna (PIN)



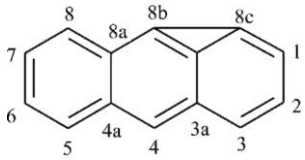
tetracen (PIN)



benzo[*m*]tetrafen (PIN)

Jeżeli najwyżej położony pierścień nie ma nie-skondensowanych atomów, numerowanie rozpoczyna się od następnego pierścienia napotkanego przy posuwaniu się wokół systemu w kierunku zgodnym z ruchem wskazówek zegara.

Przykład:

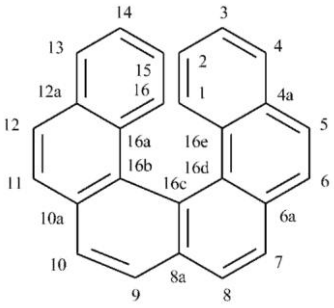


cyklopropa[*de*]antracen (PIN)

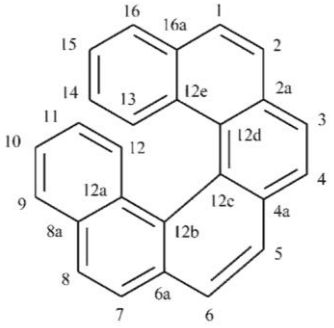
Rozdziały FR-5.3, FR-5.4 i FR-5.5 w odn.4 opisują numerowanie bardziej skomplikowanych struktur.

Zmianie uległy zwłaszcza orientacja i numerowanie helicenów. Zalecane i poprzednie numerowanie heksahelicenów pokazane jest poniżej. Wyższe heliceny podlegają tym samym zasadom.

Helicen orientuje się tak, że krańcowy pierścień znajduje się w prawym górnym kwadrancie; numerowanie zawsze zaczyna się od krańcowego pierścienia.



heksahelicen
(nowa orientacja
i numerowanie)

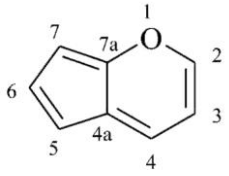


Uwaga: orientacja i numerowanie już nie zalecane ale ciągle stosowane przez CAS dla układu pierścieni o nazwie fenantro[3,4-*c*]fenantren, odn. 22

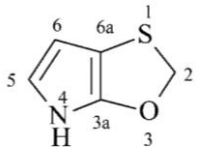
P-25.3.3.1.2 Jeżeli po zastosowaniu P-25.3.3.1.1 pozostaje alternatywne numerowanie układu pierścieni (także alternatywne położenie heteroatomów) stosuje się nastepujace kryteria aż do osiągnięcia decyzji.

(a) Niskie lokanty przypisuje się heteroatomom rozpatrywanym jako zestaw bez uwzględniania rodzaju heteroatomów.

Przykłady:



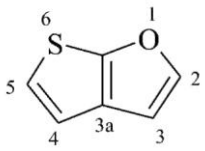
cyklopenta[*b*]piran (PIN)

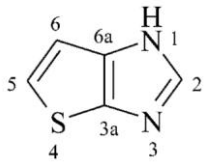


2*H*,4*H*-[1,3]oksatiolo[5,4-*b*]pirol (PIN)

(b) niskie lokanty przypisuje się heteroatomom w kolejności: F > Cl > Br > I >O > S > Se > Te >N > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al > Ga > In > Tl;

Przykład:

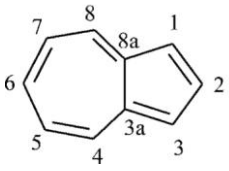




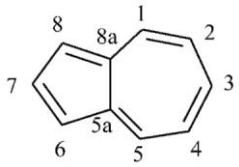
tieno[2,3-*b*]furan (PIN) 1*H*-tieno[2,3-*d*]imidazol (PIN)

(c) niskie lokanty przypisuje się atom węgla na złączach;

Przykłady:

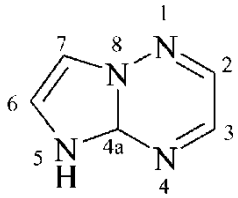


nie

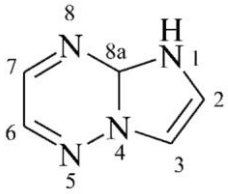


azulen (PIN)

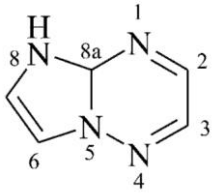
Wyjaśnienie:lokanty ‘3a,8a’ są niższe od ‘5a,8a’.



nie



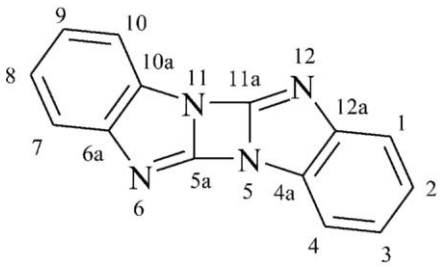
nie



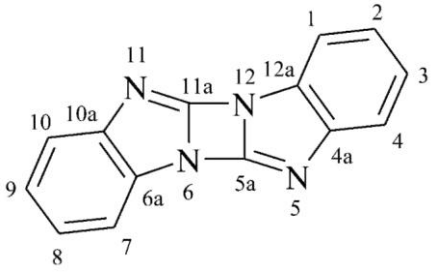
imidazo[1,2-b][1,2,4]triazyna

Wyjaśnienie: lokant ‘4a’ jest niższy od ‘8a’.

(d) niższe lokanty przypisuje się chętniej heteroatomom skondensowanym niż nie-skondensowanym atomom tego samego pierwiastka;



nie

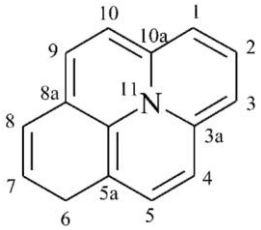


[1,3]diazeto[1,2-*a*:3,4-*a'*]dibenzoimidazol (PIN)

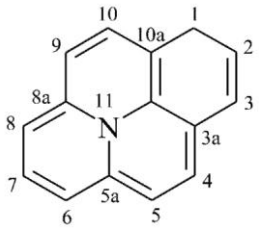
Wyjaśnienie: lokant ‘5’ jest niższy od ‘6’.

(e) Niskie lokanty przypisuje się tak, żeby wewnętrzny heteroatom był bliżej (to znaczy oddalony o mniejszą ilość wiązań po drodze) obwodowego skondensowanego atomu o najniższym lokancie (wewnętrzne numerowanie patrz P-25.3.3.2);

Przykład:



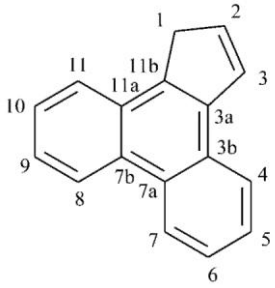
nie



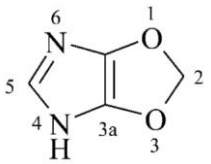
6*H*-chinolizyno[3,4,5,6-*ija*]chinolina

Wyjaśnienie : lokant ‘3a’ atomu sąsiadującego z atomem azotu jest niższy od ‘5a’.

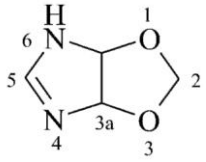
(f) niskie lokanty przypisuje się wskazanym atomom wodoru (wyrażonym lub implikowanym);



1*H*-cyklopenta[*l*]fenantren (PIN)



nie



2*H*,4*H*-[1,3]dioksolo[4,5-*d*]imidazol (PIN)

prawidłowo

2*H*,6*H*-[1,3]dioksolo[4,5-*d*]imidazol

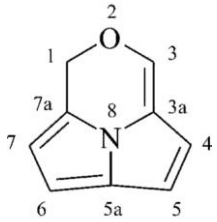
nieprawidłowo

Wyjaśnienie: zestaw lokantów ‘2,4’ dla wskazanych atomów wodoru jest niższy od ‘2,6’.

P-25.3.3.2 Numerowanie obwodowych heteroatomów

P-25.3.3.2.1 Wewnętrzne heteroatomy, nie utożsamiane z nomenklaturą ‘a’ zamiany szkieletu, numeruje się po obwodowych atomach kontynuując ustaloną kolejność numerów [patrz także P-25.3.3.1.2 (e)]. Porównaj z numerowaniem wewnętrznych atomów węgla (patrz P-25.3.3.3).

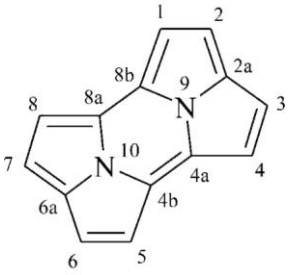
Przykład:



1*H*-[1,4]oksazyno[3,4-*cd*]pirolizyna (PIN)

P-25.3.3.2.2. Jeżeli istnieje możliwość wyboru, wybiera się najkrótszą drogę czyli najmniejszą liczbę wiązań od każdego heteroatomu do obwodu. Najniższy numer otrzymuje heteroatom, który ma najkrótszą droga łączącą z atomem z obwodowym o najniższym numerze.

Przykład:

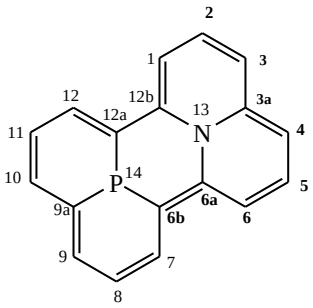


pirazyno[2,1,6-*cd*:3,4,5-*c′d′*]dipirolizyna (PIN)

Wyjaśnienie: heteroatom z numerem 9 jest oddalony o jedno wiązanie od ‘2a’, który jest niższy od ‘4b’.

P-25.3.3.2.3 Jeżeli istnieje wybór pomiędzy heteroatomami różnych pierwiastków to niższy lokant przypisuje się zgodnie z kolejnością: F > Cl > Br > I > O > S > Se >Te > N > P > As > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al > Ga > In > Tl.

Przykład:



fosfinolizyno[4′,5′,6′:3,4,5]azafosfinino[2,1,6-*de*]chinolizyna (PIN)

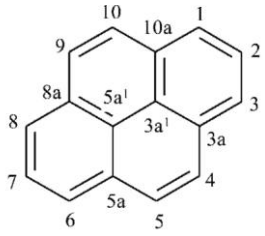
Wyjaśnienie: Atom azotu ma niższy lokant od atomu fosforu.

P-25.3.3.3 Numerowanie wewnętrznych atomów węgla

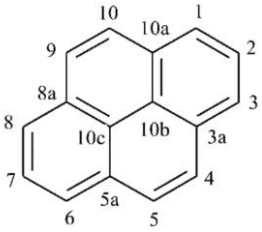
P-25.3.3.3.1 Wewnętrzne atomy numeruje się po ustaleniu najmniejszej liczby wiązań łączących je z atomami na obwodzie. Wewnętrzny atom otrzymuje lokant atomu obwodowego z górnym indeksem wskazującym liczbę wiązań dzielących oba atomy. Poprzednia reguła (Reguła A-22.2, odn.1), stale stosowana w indeksowej nomenklaturze CAS, zaleca aby wewnętrzne atomy otrzymywały najwyższe numery atomów obwodowych z kolejnymi literami dodawanymi jako indeksy górne.

To jest największa zmiana w numerowaniu wewnętrznych atomów węgla w stosunku do zalecanego w publikacji (z 1998 roku) o nomenklaturze skondensowanej (patrz FR-5.5.2 w odn. 4)

Przykłady:

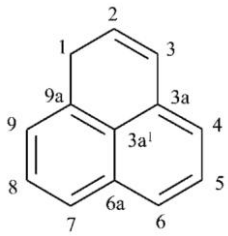


nie

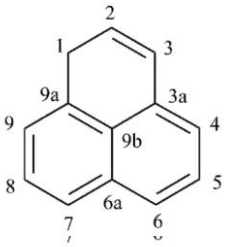


piren (PIN)
(zalecane numerowanie)

Uwaga: Już nie zalecane poprzednie numerowanie, stale stosowane w indeksowej nomenklaturze CAS

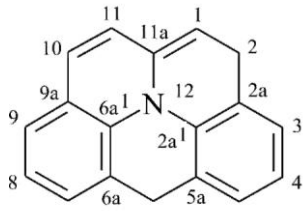


nie

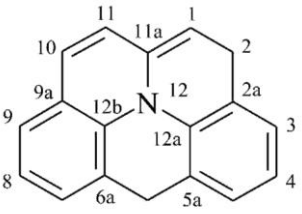


1*H*-fenalen (PIN)
(zalecane numerowanie)

Uwaga: Nie zalecane już poprzednie numerowanie, stale stosowane w indeksowej nomenklaturze CAS



nie

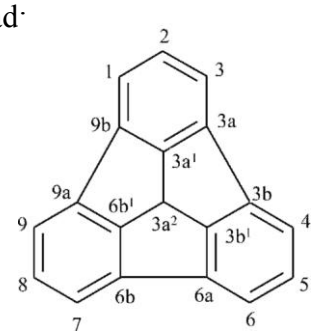


2*H*,6*H*-chinolizyno[3,4,5,6,7-*defg*]akrydyna (PIN)
(zalecane numerowanie)

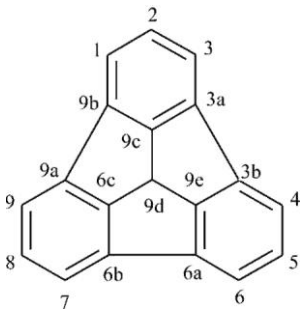
Uwaga: Nie zalecane już poprzednie numerowanie, stale stosowane w indeksowej nomenklaturze CAS

P-25.3.3.3.2 Jeżeli dla wewnętrznych atomów węgla istnieje wybór lokantów, wybiera się lokanty niższe.

Przykład·



nie



3a^2*H*-benzo[3,4]pentaleno[2,1,6,5-*jklm*]fluoren (PIN)
(zalecane numerowanie)

Uwaga: Nie zalecane już poprzednie numerowanie, stale stosowane w indeksowej nomenklaturze CAS

P-25.3.4 Tworzenie polikomponentowych nazw skondensowanych

Jeżeli trzeba uwzględnić kilka nie identycznych komponentów, to jeden, i tylko jeden może być komponentem macierzystym. Wszystkie pozostałe są komponentami dołączonymi. Komponent połączony bezpośrednio z macierzystym komponentem nazywamy ‘dołączonym komponentem pierwszego stopnia’. Dołączony do niego składnik będzie ‘składnikiem drugiego stopnia’ i tak dalej. Komponenty macierzysty i pierwszego stopnia nazywa się tak jak układ dwuskładnikowy (patrz P-25.3.2).

P-25.3.4.1 W tych zaleceniach rozpatruje się trzy rodzaje nazw skondensowanych.

P-25.3.4.1.1 Nazwy skondensowane złożone z dołączonych komponentów pierwszego i wyższych stopni

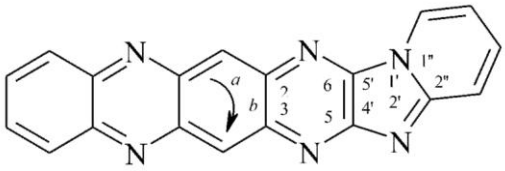
P-25.3.4.1.2 Identyczne dołączone komponenty

′ P-25.3.4.1.3 Nazwy wielomacierzyste

P-25.3.4.1.1 Nazwy skondensowane złożone z dołączonych komponentów pierwszego i wyższych stopni

Procedura wskazywania wspólnych wiązań pomiędzy dołączonymi komponentami pierwszego i wyższych stopni przypomina połączenie macierzystego komponentu z komponentem pierwszego stopnia z tą różnicą, że zamiast liter stosuje się lokanty numeryczne a dwa zestawy lokantów oddziela się dwukropkiem. Lokanty dołączonych komponentów drugiego stopnia są primowane w odróżnieniu od lokantów komponentów pierwszego rodzaju. Lokanty trzeciego stopnia są podwójnie primowane i tak dalej.

Przykład:



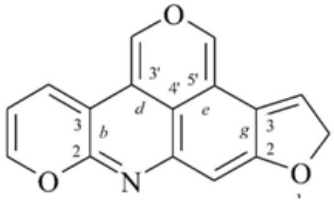
pirydo[1″,2″:1′,2′]imidazo[4′,5′:5,6]pirazyno[2,3-b]fenazyna (PIN)

P-25.3.4.1.2 Identyczne dołączone komponenty

Wielokrotność identycznych komponentów skondensowanych z macierzystym składnikiem lub wielokrotność dołączonych komponentów określa się przedrostkami ‘di’ ‘tri’ etc. (lub ‘bis’, ‘tris’etc.). Przedrostek zwielokrotniający nie bierze udziału w określaniu alfabetycznej kolejności dołączanych komponentów w skondensowanych nazwach wieloskładnikowych (patrz P-25.3.4.2.3). Zestawy lokantów oddziela się dwukropkiem, a jeżeli obecne są w nich tylko litery to rozdziela się je przecinkami.

Przykłady:

difuro[3,2-*b*:2′,3′-*e*]pirydyna (PIN)

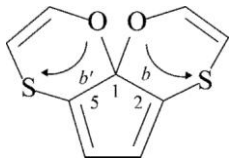


5*H*-furo[3,2-*g*]dipirano[2,3-*b*:3′,4′,5′-*de*]chinolina)PIN)
(furo przed dipirano)

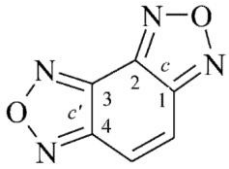
P-25.3.4.1.3 Nazwy wielomacierzyste

Wielokrotne występowanie macierzystego komponentu w wielomacierzystym systemie wskazuje się przedrostkami zwielokrotniającymi ‘di’, ‘tri’ etc'. lub ‘bis’, ‘tris’etc. Dla rozróżnienia macierzystych komponentów , w drugim lokanty są primowane, w trzecim podwójnie primowane itd.

Użycie zamykających nawiasów po ‘bis’, ‘tris’etc. wskazujących wielokrotne występowanie macierzystego komponentu jest nowością w stosunku do zaleceń z 1998 roku dotyczących nomenklatury skondensowanej (odn.4).



cyklopenta[1,2-*b*:1,5-b′]bis([1,4]oksatiin (PIN)



benzo[1,2-*c*:3,4-c′]bis([1,4]oksadiazol) (PIN)

P-25.3.4.2 Tworzenie polikomponentowych nazw skondensowanych

Polikomponentowe nazwy skondensowane tworzy się stosując szczegółowe zasady starszeństwa i reguły. Opracowując je należy ustalić:

P-25.3.4.2.1 Porządek starszeństwa przy wyborze macierzystych komponentów
P-25.3.4.2.2 Porządek starszeństwa przy wyborze dołączonych komponentów

P-25.3.4.2.3 Porządek wymieniania przedrostków skondensowania
P-25.3.4.2.4 Porządek starszeństwa lokantów (litery i liczby)

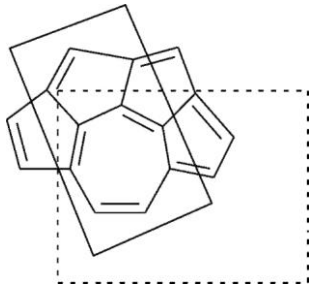
P-25.3.4.2.1 Porządek starszeństwa przy wyborze macierzystych komponentów

Jeżeli istnieją dwa lub więcej położeń macierzystego komponentu w strukturze skondensowanych pierścieni stosuje się kolejno podane niżej kryteria aż do uzyskania pełnego rozróżnienia. W podanych dalej przykładach starsze położenie oznaczone jest prostokątem o pełnych liniach, inne położenia oznacza się prostokątami o bokach z linii przerywanych.

Starszym położeniem jest:

(a) takie, które umożliwia nazwanie całego układu pierścieni według nomenklatury skondensowanej, wykluczając nazwy mostkowych układów skondensowanych;

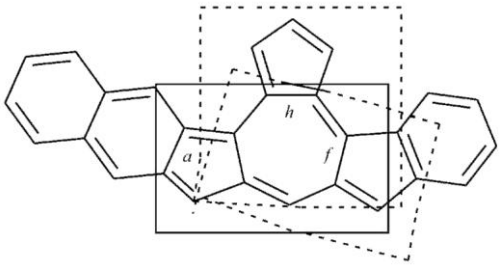
Przykład:



cyklopenta[*ij*]pentaleno[2,1,6-*cde*]azulen (PIN)
(nie 1,9-metenopentaleno[1,6-*e*]azulen
ani 1,9-metenodicyklopenta[*cd,f*]azulen;
nazwy, w których występuje przedrostek
'meteno' są nazwami mostkowych układów
skondensowanych)

(b) takie, że utworzona nazwa nie wymaga dołączonych komponentów o stopniach wyższych niż pierwszy. W celach dydaktycznych, nazwy dołączonych komponentów o stopniach wyższych niż pierwszy pisze się wytłuszczonymi literami;

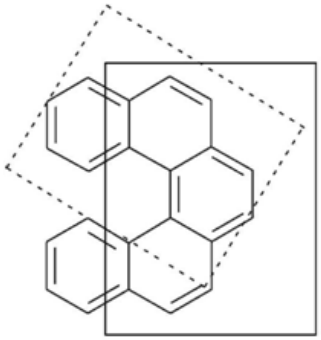
Przykład:



cyklopenta[*h*]indeno[2,1-*f*]nafto[2,3-*a*]azulen (PIN)
(nie benzo[*a*]**benzo**[5,6]indeno[2,1-*f*]cyklopenta[*h*]azulen
ani **benzo**[5,6]indeno[1,2-*e*]indeno[2,1-*h*]azulen; w nazwie
zalecanej nie ma składników drugiego rodzaju)

(c) położenie, które skutkuje największą liczbą dołączonych komponentów pierwszego rodzaju, dołączonych komponentów drugiego rodzaju etc. To kryterium prowadzi do najmniejszej liczby dołączonych komponentów wyższych rodzajów i ogranicza ilość primowanych deskryptorów skondensowania.

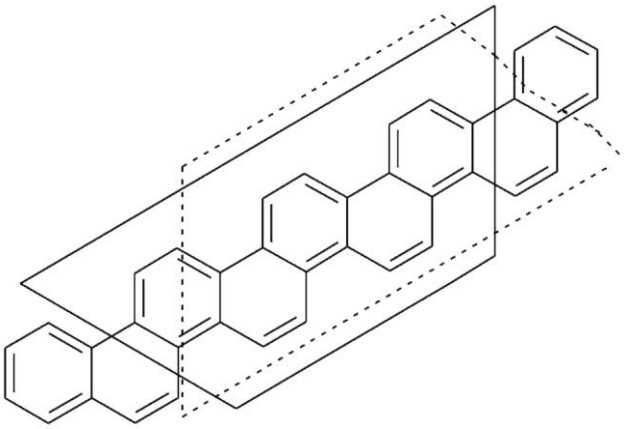
Przykład:



dibenzo[*c*,*g*]fenantren (PIN)
(nie nafto[2,1-*c*]fenantren;
dwa dołączone składniki
preferowane względem jednego)

(d) położenie pozwalające na przedstawienie przedrostkami zwielokrotniającymi największej liczby dołączonych komponentów;

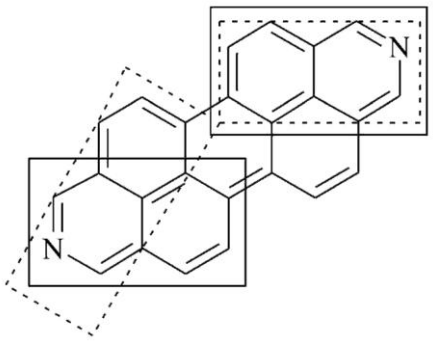
Przykład:



dinafto[1,2-*c*:2′,1′- *m*]picen (PIN)
(nie benzo[*c*]fenantreno[2,1-*m*]picen)

(e) położenie, w którym wystąpi starszy wewnętrzny komponent macierzysty;

Przykład:



antra[[2,1,9-*def*:6,5,10-*d′e′f′*]diizochinolina (PIN)
(nie fenantro[2,1,10-*def*:7,8,9-*d′e′f′*]diizochinolina;
antracen jest starszy od fenantrenu)

(d) położenie, które skutkuje obecnością preferowanych dołączonych komponentów pierwszego rodzaju, potem drugiego rodzaju, itd. To kryterium jest świetnie omówione i zilustrowane w oryginalnej publikacji (patrz FR-3.3.1 w odn. 4).

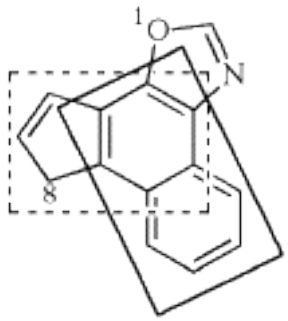
P-25.3.4.2.2 Porządek starszeństwa przy wyborze dołączonych komponentów

Po ustaleniu związku macierzystego (patrz P-25.3.2.4) [lub macierzystych komponentów i wewnętrznych macierzystych komponentów, jeżeli wybiera się nazwę wielomacierzystą], pozostałe pierścienie identyfikuje się, w miarę możliwości, jako dołączone komponenty. Jeżeli istnieje wybór, najpierw rozpatruje się dołączone komponenty pierwszego rodzaju, następnie drugiego rodzaju i tak dalej. Podane poniżej kryteria stosuje się kolejno aż do osiągnięcia decyzji:

Uwaga: W przytoczonych przykładach , preferowane dołączone komponenty oznaczone są pełnymi liniami, a ich alternatywy – liniami przerywanymi.

(a) Jeżeli istnieją alternatywne dołączone komponenty pierwszego rodzaju, wybiera się starszy pierścień lub układ pierścieni. Tę samą procedurę stosuje się do dołączonych komponentów drugiego rodzaju, i tak dalej.

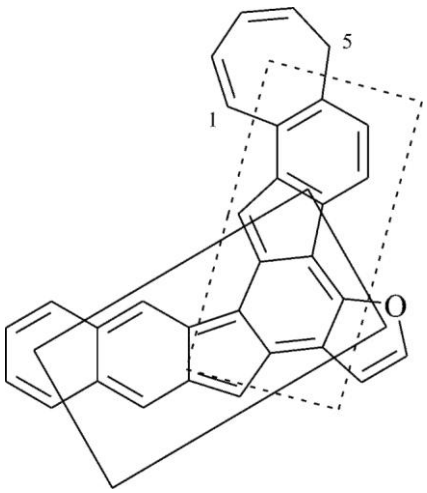
Przykład:



8*H*-cyklopenta[3,4]nafto[1,2-*d*][1,3]oksazol (PIN)
(nie 8*H*-benzo[6,7]indeno[5,4-*d*][1,3]oksazol;
naftalen jest starszy od indenu)

(b) położenia o niższych lokantach jako zestaw do skondensowania dołączonych komponentów pierwszego rodzaju z macierzystym podstawnikiem;

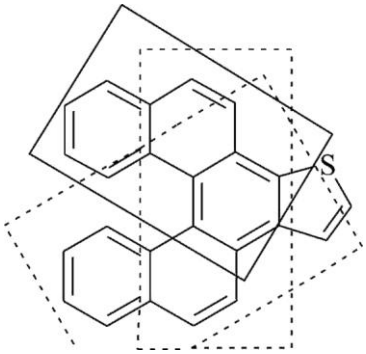
Przykład:



5*H*-benzo[6,7]cyklohepta[4′,5′]indeno[1′,2′:3,4]fluoreno[2,1-*b*]furan (PIN)
(nie 5*H*-benzo[5′,6′]indeno[1′,2′:1,2]cyklohepta[7,8]fluoreno[4,3-*b*]furan;
lokanty 1,2 dla dołączonego składnika fluorenu są niższe od 3,4)

(c) położenie o najniższych lokantach do kondensowania z macierzystym składnikiem w kolejności wymieniania;

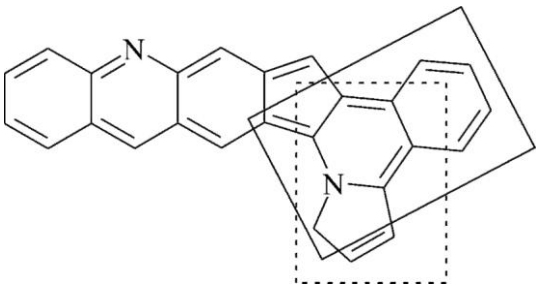
Przykład:



nafto[2′,1′:3,4]fenantro[1,2-*b*]tiofen (PIN)
(nie nafto[2′,1′:3,4]fenantro[2,1-*b*]tiofen ani dibenzo[3,4:5,6]fenantro[2,1-*b*]tiofen; lokanty ‘1,2’ dla dołączonego składnika ‘fenantro’ w kolejności cytowania są niższe od ‘2,1’ lub ‘9,10’)

Tą procedurę rozszerza się na zewnątrz dla starszych dołączonych komponentów drugiego rodzaju:

Przykład:

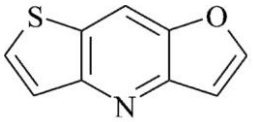


7*H*-pirolo[2″,1″:1′,2′]izochinolino[4′,3′:4,5]cyklopenta[1,2-*b*]akrydyna (PIN)
(nie 7*H*-benzo[7′,8′]indolizyno[6′,5′:4,5]cyklopenta[1,2-*b*]akrydyna; izochinolina jest starsza od indolizyny)

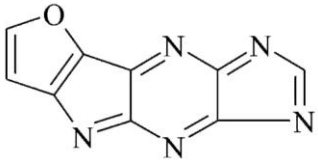
P-25.3.4.2.3 Kolejność wymieniania przedrostków kondensacji

P-25.3.4.2.3.1 Kondensację dwóch dołączonych komponentów wskazuje się metodą opisaną w P-25.3.2. Wszystkie dołączone komponenty wymienia się przed macierzystym komponentem. Każdy dołączony komponent drugiego rodzaju wymienia się przed dołączonym komponentem pierwszego rodzaju, z którym jest on skondensowany i tak dalej do dołączonych komponentów wyższych rodzajów. Jeżeli istnieją dwa lub więcej różnych komponentów lub zestawów komponentów dołączonych do komponentu niższego rodzaju, wymienia się je w porządku alfabetycznym.

Przykłady:



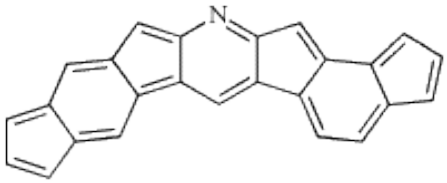
furo[3,2-*b*]tieno[2,3-*e*]pirydyna (PIN)
(furo wymienia się przed tieno)



furo[2′,3′:4,5]pirolo[2,3-*b*]imidazo[4,5-*e*]pirazyna (PIN)
(furo ….. pirolo wymienia się przed imidazo)

Uwaga: W przypadku indacenów, jedyną różnicą między *s*-indacenem i *as*-indacenem, są pisane kursywą litery. W przypadku kolejności alfabetycznej traktuje się oba jako indacen. W szeregowaniu starszeństwa składników *s*-indacen jest starszy od *as*-indacenu.

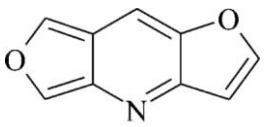
Przykład:



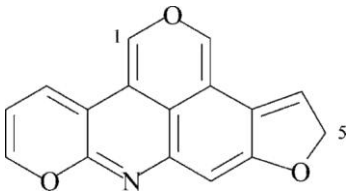
as-indaceno[2,3-*b*]-*s*-indaceno[1,2-*e*]pirydyna (PIN)

P-25.3.4.2.3.2 Dwa lub więcej identycznych komponentów skondensowanych z trzecim składnikiem wymienia się razem, stosując przedrostki zwielokrotniające (‘di’, ‘tri’ etc. lub ‘bis’, ‘tris’etc.). Różne komponenty wymienia się w kolejności alfabetycznej nazw, tak jak to jest w nomenklaturze podstawnikowej z prostymi przedrostkami multiplikatywnymi. Multiplikatywny przedrostek bierze się pod uwagę tylko wtedy, kiedy jest on integralną częścią wieloczęściowego przedrostka kondensacji.

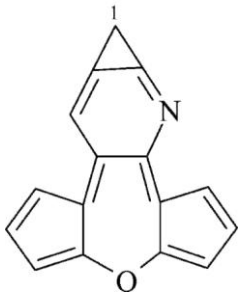
Przykład:



difuro[3,2-*b*:3′,4′-*e*]pirydyna (PIN)



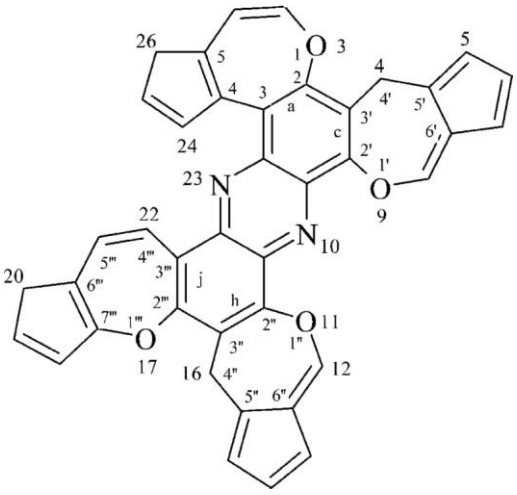
5*H*-furo[3,2-*g*]dipirano[2,3-*b*:3′,4′,5′-*de*]chinolina (PIN)
(furo wymienia się przed pirano)



1*H*-cyklopropa[*b*]dicyklopenta[2,3:6,7]oksepino[4,5-*e*]pirydyna (PIN)
(nie 1*H*-dicyklopenta[2,3:6,7]oksepino[4,5-*b*]cyklopropa[*e*]pirydyna; cyklopropa wymienia się przed dicyklopentaoksepino, który traktuje się jako jeden składnik)

P-25.3.4.2.3.3 Jeśli dwie lub więcej grup komponentów różni się tylko lokantami skondensowania wewnątrz grupy, lokanty te wyznaczają porządek wymieniania przedrostków; niższe lokanty wymienia się wcześniej.

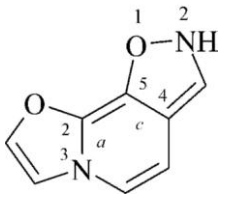
Przykład:



4*H*,16*H*,20*H*,26*H*-cyklopenta[4,5]oksepino[3,2-*a*]bis(cyklopenta[5,6]oksepino)=
[3′,2′-*c*:2″,3″-*h*]cyklopenta[6‴,7‴]oksepino[2‴,3‴-*j*]fenazyna (PIN)

P-25.3.4.2.3.4 Jeśli dwie lub więcej grup komponentów różni się tylko lokantami heteroatomów, lokanty te wyznaczają porządek wymieniania; niższe zestawy lokantów wymienia się wcześniej.

Przykłady:



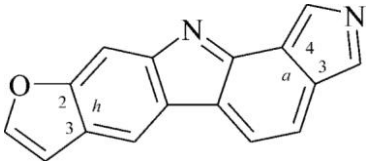
2*H*-[1,2]oksazolo[5,4-*c*][1,3]oksazolo[3,2-*a*]pirydyna (PIN)

P-25.3.4.2.4 Porządek starszeństwa lokantów (liter i numerów)

Jeżeli możliwy jest wybór lokantów, liter i liczb (zgodnie z numeracją komponentów), wybiera się niższe litery i liczby w zgodzie z przedstawionymi kryteriami, stosowanymi do podjęcia końcowej decyzji.

(a) zestaw liter w nazwie macierzystego komponentu;

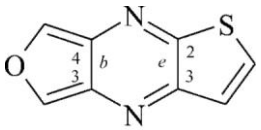
Przykład:



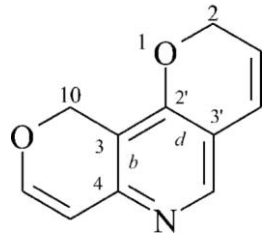
furo[3,2-*h*]pirolo[3,4-*a*]karbazol (PIN)
(nie furo[2,3-*b*]pirolo[3,4-*i*]karbazol
a,*h* jest nizsze od *b*,*i*)

(b) litery w nazwie macierzystego komponentu w kolejności wymieniania;

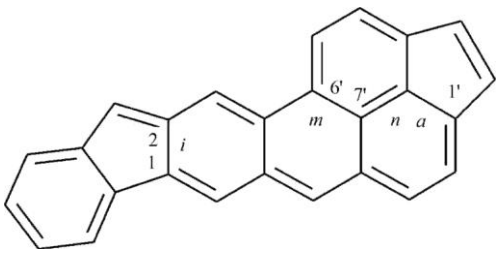
Przykłady:



furo[3,4-*b*]tieno[2,3-*e*]pirazyna (PIN)
(nie furo[3,4-*e*]tieno[2,3-*b*]pirazyna;
b……*e* jest niższe niż *e*…..*b*)



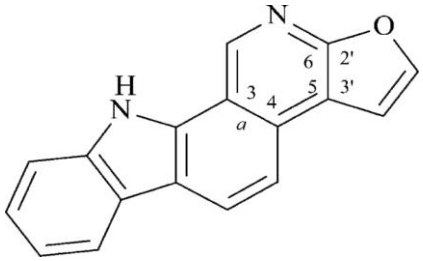
2*H*,10*H*-dipirano[4,3-*b*;2′,3′-*d*]pirydyna (PIN)
(nie 2*H*,10*H*-dipirano[4,3-*d*;4′,3′-*b*]pirydyna;
b…*d* jest niższe od *d*….*b*)



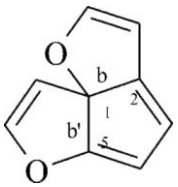
diindeno[1,2-*i*:6′,7′,1′-*mna*]antracen (PIN)
(nie diindeno[6,7,1- *mna:* 1′,2′-*i*]antracen;
i…*mna* jest niższe od *mna*….i)

(c) Zestaw lokantów skondensowania dołączonych komponentów pierwszego rodzaju z macierzystym składnikiem;

Przykłady:



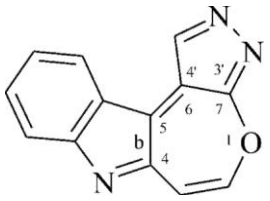
10*H*-furo[3′,2′:5,6]pirydo[3,4-*a*]karbazol (PIN)
(nie 10*H*-furo[2′,3′:2,3]pirydo[5,4-*a*]karbazol; zestaw lokantów dołączenia pirydo do karbazolu ‘3',4’ jest niższy od ‘4,5’)



cyklopenta[1,2-*b*:5,1-*b*′]difuran (PIN, nazwa wielomacierzyste)
(nie cyklopenta[1,2-*b*:2,3-*b*′]di furan; zestaw lokantów ‘1,1,2,5’ jest niższy od ‘1,2,2,3’)

(d) Lokanty kondensacji dołączonych komponentów pierwszego rodzaju z macierzystym komponentem w kolejności wymieniania.

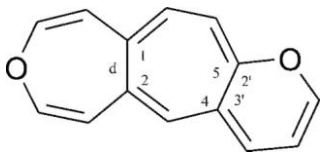
Przykład:



pirazolo[4′,3′:6,7]oksepino[4,5-*b*]indol (PIN)
(nie pirazolo[3′,4′:2,3]oksepino[5,4-*b*]indol; zestaw lokantów ‘4,5’jest niższy od ‘5,4’)

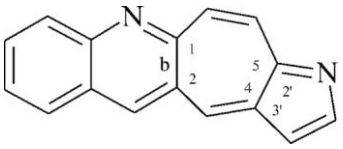
(e) Zestaw lokantów dołączonych komponentów niższego stopnia do kondesacji z dołączonymi komponentami wyższego stopnia

Przykład:



pirano[3′,2′:4,5]cyklohepta[1,2-*d*]oksepin (PIN)
(nie pirano[2′,3′:5,6]cyklohepta[1,2-*d*]oksepin; zestaw lokantów ‘4,5’ jest niższy niż ‘5,6’)

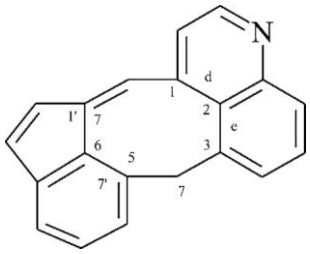
(f) Lokanty dołączonych komponentów niższego stopnia do kondensacji z dołączonymi komponentami wyższego stopnia w kolejności wymieniania:



pirolo[3′,2′:4,5]cyklohepta[1,2-*b*]chinolina (PIN)
(nie pirolo[2′,3′:5,4]cyklohepta[1,2-*b*]chinolina
zestaw lokantów ‘4,5’ jest niższy niż ‘5,4’)

(g) Lokanty dołączonych komponentów wyższego stopnia, jako zestaw do kondensacji do dołączonych komponentów niższego stopnia.

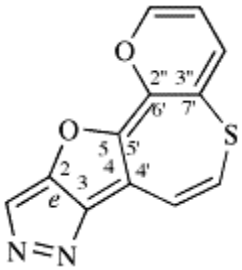
Przykład:



7*H*-indeno[7′,1′:5,6,7]cyklookta[1,2,3-*de*]chinolina (PIN)
(nie 7*H*-indeno[3′,4′:5,6,7]cyklookta[1,2,3-*de*]chinolina;
zestaw lokantów ‘1,7’ jest niższy niż ‘3,4’)

(h) Lokanty komponentów wyższego stopnia skondensowanych z komponentami niższego stopnia w kolejności wymieniania.

Przykład:



pirano[2″,3″:6′,7′]tiepino[4′,5′:4,5]furo[3,2-*c*]pirazol (PIN)
(nie pirano[3″,2″:2′,3′]tiepino[5′,4′:4,5]furo[3,2-*c*]pirazol;
zestaw lokantów ‘4′,5′’ jest niższy niż ‘5′,4′’)

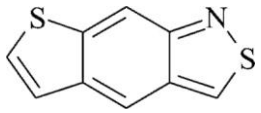
P-25.3.5 Heteromonocykliczne pierścienie skondensowane z pierścieniem benzenu

Heterobicykliczne związki zbudowane z heteromonocyklu skondensowanego z pierścieniem benzenu , w których pierścień benzenu nie jest częścią układu o zachowanej nazwie takiej jak chinolina lub naftalen traktuje się jako pojedynczą jednostkę (‘benzenoheterocykl’, patrz P-25.2.2.4). Można ją uważać za związek macierzysty lub dołączony komponent zależnie od porządku starszeństwa opisanego w P-25.3.2.4. Jednakże nie można stosować takiego podejścia jeżeli zakłóca

ono system wielomacierzysty (patrz P-25.3.5.3) lub użycie przedrostków zwielokrotniających (patrz P-25.3.6.1, poniżej).

P-25.3.5.1 Benzenoheterocykl jako związek macierzysty

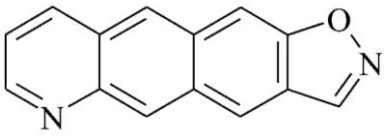
Przykład:



tieno[3,2-*f*][2.1]benzotiazol (PIN)
(2,1-benzotiazol jest starszy od 1-benzotiofenu)

P-25.3.5.2 Starszy składnik jako składnik macierzysty

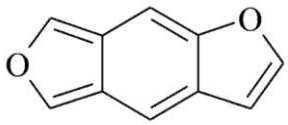
Przykład:



[1,2]benzoksazolo[6,5-g]chinolina (PIN)
(chinolina jest starsza od 1,2-benzoksazolu)

P-25.3.5.3 Jeżeli istnieje wybór, nazwę wielomacierzystą preferuje się względem nazwy układu pierścieni skondensowanych.

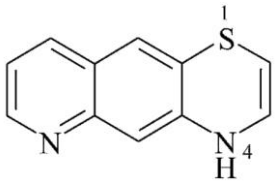
Przykład:



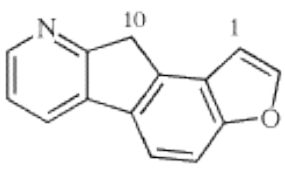
benzo[1,2-*b*:4,5-*c*′]difuran (PIN)
(nie furo[3,4-*f*][1]benzofuran; nazwa wielomacierzysta jest preferowana względem dwuskładnikowej nazwy skondensowanej)

P-25.3.5.4 Nazwy zachowane są starsze od nazw benzenoheterocykli.

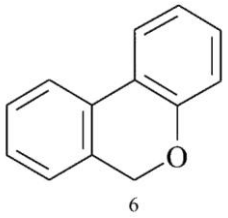
Przykłady:



4*H*-[1,4]tiazyno[2,3-*g*]chinolina (PIN)
(musi być użyta nazwa zachowana chinolina)



10*H*-furo[3′,2′:4,5]indeno[2,1-*b*]pirydyna (PIN)
(nie [1]benzofuro[5′,4′:3,4]cyklopenta[1,2-*b*]pirydyna; pirydyna jest starsza od furanu; musi być użyta zachowana nazwa inden)

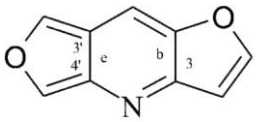


6*H*-dibenzo[*b*,*d*]piran (PIN)
(nie 6*H*-benzo[*c*][1]benzopiran;
nie 6*H*-benzo[*b*][2]benzopiran)
6*H*-benzo[*c*]chromen

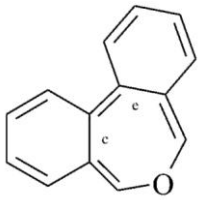
P-25.3.6 Identyczne dołączone komponenty

P-25.3.6.1 Dwa lub więcej komponentów identycznych i skondensowanych z macierzystym komponentem wskazuje się stosując przedrostki zwielokrotniające (‘di’, ‘tri’ etc. lub ‘bis’, ‘tris’etc.) Jeżeli dla dołączonych komponentów pierwszego stopnia skondensowanych z macierzystym komponentem stosuje się kompletny zestaw lokantów to wymienia się je razem, oddzielone dwukropkiem. Jeżeli stosuje się skrócony zestaw lokantów, litery oddziela się przecinkiem. Jeżeli stosuje się kompletny zestaw lokantów dla dołączonych komponentów drugiego stopnia skondensowanych z dołączonymi komponentami pierwszego lub wyższych stopni, lokanty wymienia się razem i oddziela średnikami. Jeżeli stosuje się skrócone zestawy, oddziela się je dwukropkiem. Dla rozróżnienia dwóch lub więcej komponentów tego samego stopnia lokanty drugiego są primowane (lub podwójnie primowane jeżeli lokanty pierwszego są primowane), trzeciego podwójnie primowane i tak dalej.

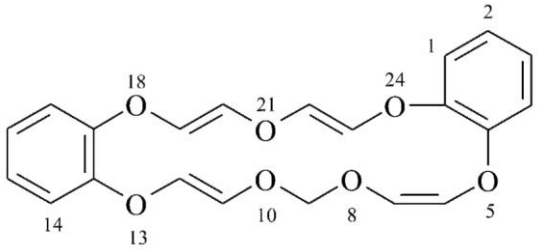
Przykłady:



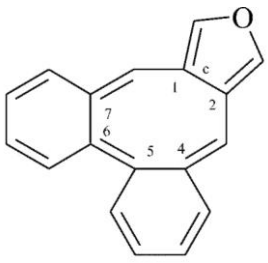
difuro[3,2-*b*:3′,4′-*e*]pirydyna (PIN)



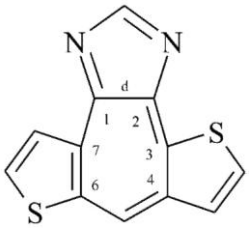
dibenzo[*c*,*e*]oksepin (PIN)



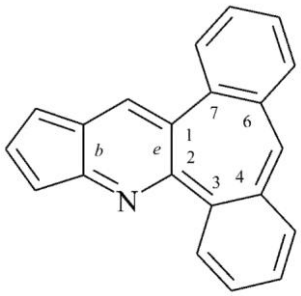
9*H*-dibenzo[*g*,*p*][1,3,6,9,12,15,18]heptaoksacykloikozyn (PIN)



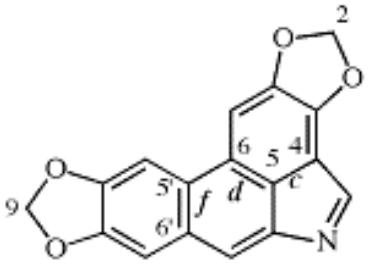
dibenzo[4,5:6,7]cyklookta[1,2-*c*]furan (PIN)



ditieno[2′,3′:3,4;2″,3″:6,7]cyklohepta[1,2-*d*]imidazol (PIN)



cyklopenta[*b*]dibenzo[3,4:6,7]cyklohepta[1,2-*e*]pirydyna (PIN)

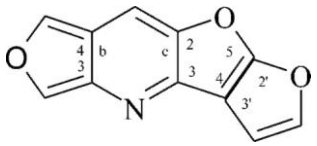


2*H*,9*H*-bis([1,3]benzodioksolo)[4,5,6-*cd*:5′,6′-*f*]indol (PIN)

P-25.3.6.2 Dodatkowe komponenty dołączone do układu z multiplikatywnym przedrostkiem.

Skondensowanie dołączonego komponentu wyższego stopnia z układem, w nazwie którego występuje multiplikatywny przedrostek, wymaga wymienienia osobno każdego zespołu dołączanych komponentów.

Przykład:



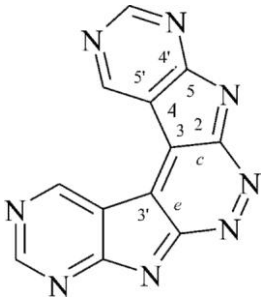
furo[3,4-*b*]furo[3′,2′:4,5]furo[2,3-*e*]pirydyna
(układ z multiplikatywnym przedrostkiem: difuro[3,2-*b*:3′,4′-*e*]pirydyna)

P-25.3.6.3 Identyczne komponenty z identycznymi lokantami skondensowania.

Dwie lub więcej grup identycznych komponentów (włączając identyczne lokanty skondensowania między tymi komponentami) skondensowanych z innym komponentem, wskazuje

się przedrostkami zwielokrotniającymi ‘bis’, ‘tris’etc. a nazwę grupy komponentów wymienia się w nawiasie.

Przykłady:



bis(pirymido[5′,4′:4,5]pirolo)[2,3-*c*:3′,2′-*e*]pirydazyna (PIN)

P-25.3.7 Wielomacierzysty układ pierścieni

Wielokrotną obecność macierzystego komponentu w układzie wielomacierzystym wskazuje się zwielokrotniającymi przedrostkami ‘di’, ‘tri’ etc. lub ‘bis’, ‘tris’, etc. Dla rozróżnienia macierzystych komponentów, lokanty drugiego mają lokanty primowane, lokanty trzeciego – podwójnie primowane etc.

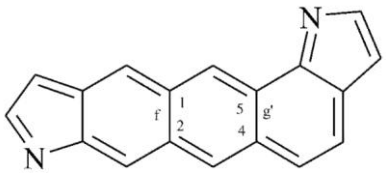
Dwa lub więcej nienakładających się położeń macierzystych komponentów, *orto*- lub *orto*- i *peri*-skondensowanych z tym samym wewnętrznym macierzystym komponentem traktuje się jako system wielomacierzysty i tak też nazywa. Podobnie układ z trzema, pięcioma, siedmioma etc. wewnętrznymi macierzystymi komponentami traktuje się jako rozszerzony układ wielomacierzyste. Każda para wewnętrznych macierzystych komponentów drugiego lub wyższych stopni musi być identyczna.

P-25.3.7.1 Układ wielomacierzyste z jednym wewnętrznym macierzystym komponentem

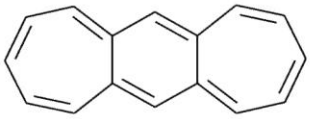
Wielokrotną obecność macierzystego komponentu w układzie wielomacierzystym wskazuje się zwielokrotniającymi przedrostkami ‘di’, ‘tri’ etc. lub ‘bis’, ‘tris’etc. Dla rozróżnienia macierzystych komponentów, drugi macierzysty komponent ma lokanty primowane, trzeci – podwójnie primowane etc.; zestawy lokantów oddziela się dwukropkiem.

Użycie w tych zaleceniach nawiasów po ‘bis’, ‘tris’etc. wskazujących wielokrotną obecność macierzystych komponentów jest zmianą w stosunku do zaleceń przedstawionych w publikacji z 1988 r. na temat nomenklatury skondensowanej (odn.4)

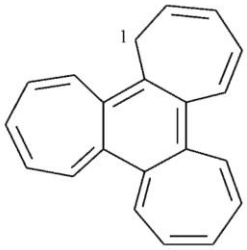
Przykłady:



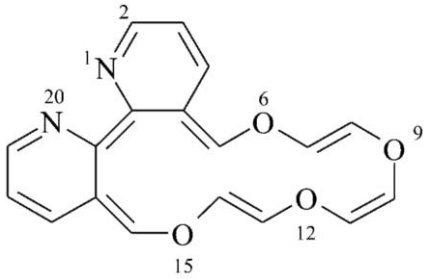
benzo[1,2-*f*:4,5-*g*′]diindol (PIN)



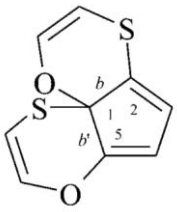
benzo[1,2:di[7]annulen (PIN)



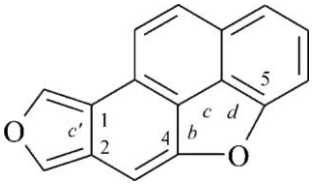
1*H*-benzo[1,2:3,4:5,6]tri[7]annulen (PIN)



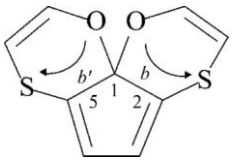
[1,4,7,10]tetraoksacykloheksadecyno[13,12-*b*:14,15-*b*′]dipirydyna (PIN)



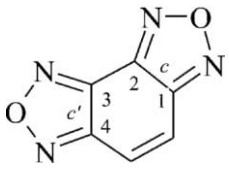
cyklopenta[1,2-*b*:5,1-*b*′]bis([1,4]oksatiin) (PIN)



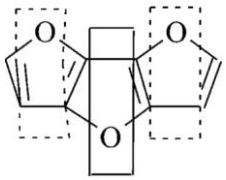
fenantro[4,5-*bcd*:1,2-*c*′]difuran (PIN)



cyklopenta[1,2-*b*:1,5-b']bis[1,2,5]oksatiin (PIN)



benzo[1,2-*c*:3,4-*c*′]bis([1,2,5]oksadiazol) (PIN)

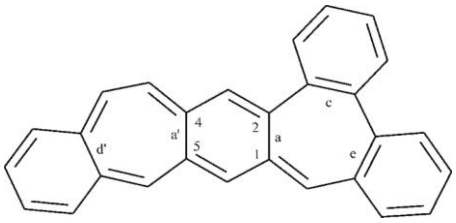


furo[3,2-*b*:4,5-*b*′]difuran (PIN, nazwa wielomacierzysta)
[nie difuro[3,2-*b*:2′,3′-*d*]furan (nazwa multipliktywnego przedrostka), metodę wielomacierzystą stosuje się w sytuacjach kiedy są trzy identyczne skondensowane pierścienie lub układy pierścieni, zgodnie z zasadą pierwszeństwa liczby macierzystych pierścieni względem liczby dołączonych komponentów]

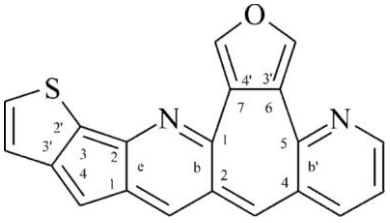
P-25.3.7.2 Dodatkowe dołączone komponenty

Dodatkowe dołączone komponenty mogą być dokondensowane to każdego komponentu w układzie wielomacierzystym. Jeżeli finalny wybór lokantów, tak jak opisano w P-25.3.4.2.4, nie pozwala na dokonanie wyboru, starszeństwo przypisuje się komponentom nieprimowanym, a litery określające skondensowanie przypisuje się tak, aby niższe przypadały komponentowi wiążącemu. Szczególną uwagę należy poświęcić primom, podwójnym primom etc. tak aby uniknąć dwuznaczności.
I tak dołączony komponent skondensowany z wewnętrznym macierzystym komponentem wymienia się zaraz za przedrostkiem określający ten wewnętrzny komponent.

Przykład:



tribenzo[*c*,*d*′,*e*]benzo[1,2-*a*:4,5-*a*′]annulen (PIN)



tieno[2′,3′:3,4]cyklopenta[1,2-*e*]furo[3′,4′:6,7]cyklohepta[1,2-*b*:5,4-*b*′]dipirydyna (PIN)
(pierścień furanu jest skondensowany z wewnętrznym macierzystym komponentem więc kolejność alfabetyczna nie obowiązuje)

P-25.3.7.3 Wielomacierzysty układ pierścieni z trzema lub większą liczbą wewnętrznych macierzystych komponentów

Kiedy dwa (lub więcej) możliwe macierzyste komponenty oddzielone są nieparzystą liczbą wewnętrznych macierzystych komponentów i są one uporządkowane symetrycznie względem ich pierścieni komponentowych (ale nie względem lokantów skondensowania) cały układ traktuje się jako układ wielomacierzysty. Nazwy tworzy się rozszerzając P-25.3.7.1 na dwa sposoby:

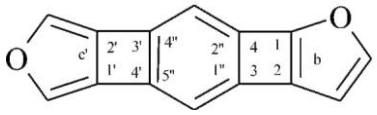
(a) wewnętrzne związki macierzyste drugiego lub wyższych stopni nazywa się używając przedrostków ‘di’, ‘tri’ etc. lub ‘bis’, ‘tris’etc. Wewnętrznym macierzystym komponentom

przypisuje się odpowiednie lokanty, nieprimowane i primowane dla wewnętrznych komponentów pierwszego stopnia, podwójnie primowane dla wewnętrznych macierzystych komponentów drugiego stopnia, potrójnie primowane dla wewnętrznych macierzystych komponentów trzeciego stopnia i tak dalej.

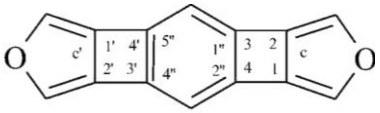
(b) Kiedy symetria pozwala na grupowanie wewnętrznych macierzystych komponentów i macierzystych komponentów, można tworzyć takie grupy i nazywać jako takie stosując przedrostki zwielokrotniające ‘bis’, ‘tris’etc. do opisania grup, których nazwy zamyka się w nawiasach. W takich przypadkach nie primuje się lokantów.

Metoda tworzenia preferowanych nazw IUPAC podana jest w P-52.2.4.3.

Przykłady:



numerowanie dla nazwy (a)



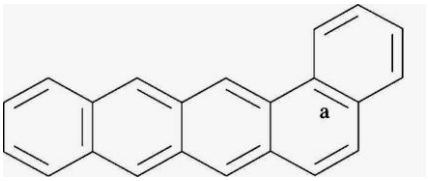
numerowanie dla nazwy (b)

(a) benzo[1″,2″:3,4;4″,5″:3′,4′]dicyklobuta[1,2-*b*:1′,2′-*c*′]difuran (PIN)
(b) benzo[1″,2″:3,4;4″,5″:3′,4′]bis(cyklobuta[1,2-*c*]furan

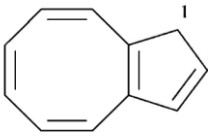
P-25.3.8 Pomijanie lokantów w deskryptorach kondensacji

P-25.3.8.1 W preferowanych nazwach IUPAC i w ogólnej nomenklaturze liczbowe i/lub literowe lokanty w nazwach skondensowanych układów pierścieni pomija się tylko dla monocyklicznych dołączonych składników węglowodorowych pierwszego stopnia ‘benzo’ i tych opisane w P-25.3.2.2.1; pomijanie jest również zalecane gdy układ pierścieni skondensowanych jest zbudowany z dwóch węglowodorów monocyklicznych.

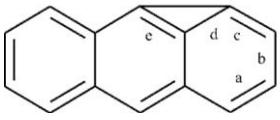
Przykłady:



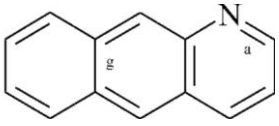
benzo[a]antracen (PIN)



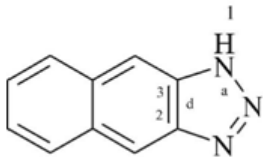
1*H*-cyklopenta[8]annulen (PIN)



cyklopropa[*de*]antracen (PIN)



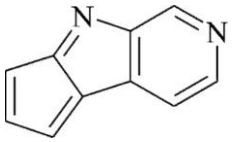
benzo[*g*]chinolina (PIN)



1*H*-nafto[2,3-*d*][1,2,3]triazol (PIN)
(nie 1*H*-nafto[2,3][1,2,3]triazol)

P-25.3.8.2 Lokanty pomija się także określając skondensowanie krańcowego monocyklicznego dołączonego komponentu węglowodorowego.

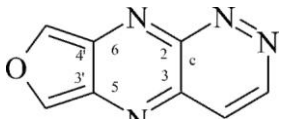
Przykład:



cyklopenta[4,5]pirolo[2,3-*c*]pirydyna (PIN)

P-25.3.8.3 Kiedy wymagane są lokanty skondensowania komponentu drugiego lub wyższych rodzajów, to należy wymienić wszystkie lokanty łączenia komponentów.

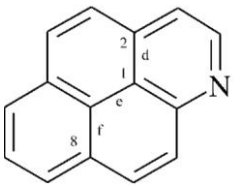
Przykład:



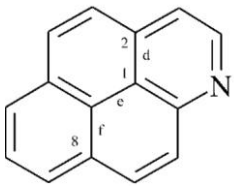
furo[3′,4′:5,6]pirazyno[2,3-*c*]pirydazyna (PIN)

P-25.3.8.4 Liczbowe lokanty obwodowych węglowych atomów skondensowania komponentu pomija się w układach *orto*- oraz *orto*- i *para* skondensowanych.

Przykłady:



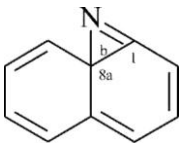
nafto[2,1,8-*def*]chinolina (PIN)



chinolizyno[4,5,6-*bc*]chinazolina (PIN)

Lokanty obu terminalnych skondensowanych atomów powinny być wymienione, chociaż jeden z nich jest atomem skondensowania.

Przykład:



nafto[1,8a-b]azyryna (PIN)

P-25.4 MOSTKOWE SKONDENSOWANE UKŁADY PIERŚCIENI

Ten rozdział opiera się na publikacji „Nomenclature of Fused and Bridged Fused Ring Systems" (odn, 4), rozdziały P-25.4.2.1.2, P-25.4.2.1.4 i P-25.4.2.2.1 zawierają modyfikacje rozdziału FR-8.3 z publikacji z 1998 r. (odn.4). Żadnych innych modyfikacji do publikacji z 1998 roku nie wprowadzono.

P-25.4.1 Definicje i terminologia
P-25.4.2 Nazwy mostków
P-25.4.3 Nazywanie skondensowanego układu mostkowego
P-25.4.4 Numerowanie atomów mostka
P-25.4.5 Porządek numerowania mostków

P-25.4.1 Definicje i terminologia

P-25.4.1.1 Mostkowe skondensowane układy pierścieni. Układ pierścieni, w którym część pierścieni tworzy skondensowany układ pierścieni (patrz P-25.0 do P-25.3), a pozostałe pierścienie tworzone są przez jeden lub więcej mostków.

P-25.4.1.2 Mostek. Atom lub grupę atomów nazywa się mostkiem i wskazuje przedrostkiem jeśli spełnia jeden lub kilka poniższych punktów.

(a) jeżeli łączy dwie lub więcej nie sąsiadujących pozycji tego samego pierścienia w układzie pierścieni skondensowanych;

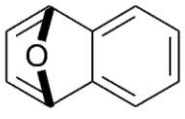
(b) jeżeli łączy dwie lub więcej pozycji w różnych pierścieniach układu pierścieni skondensowanych, a więc nie tworzy nowego *orto*- ani *orto*- oraz *peri*- skondensowanego pierścienia;

(c) jeżeli łączy pozycje pierścienia układu pierścieni skondensowanych z opisanym poprzednio mostkiem, ale nie jest częścią tego mostka;

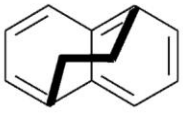
(d) jeżeli łączy atomy na końcach wiązania wspólnego dla dwóch pierścieni w skondensowanym układzie pierścieni;

(e) jeżeli jest użyty do opisu układu zawierającego tylko *orto*- oraz *orto*- *i peri*-kondensacje i nie może być nazwany wyłącznie według reguł kondensacji.

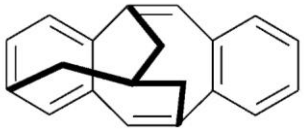
Przykłady (mostki są oznaczone grubymi liniami):



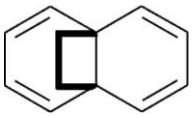
kryterium (a)



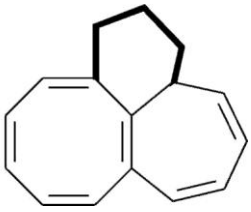
kryterium (b)



kryterium (c)



kryterium (d)



kryterium (e)

P-25.4.1.3 Atom przyczółkowy. W skondensowanym układzie pierścieni jest to atom, do którego dołączony jest mostek.

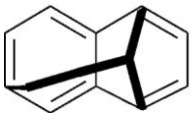
P-25.4.1.4 Prosty mostek. Mostek zawierający atom lub grupę atomów, które mogą być opisane jako pojedyncza jednostka, np. ‘epoksy’, ‘butano’, ‘benzeno’.

P-25.4.1.5 Złożony mostek. Grupa atomów, którą można opisać tylko jako ciągłą sekwencję prostych mostków, np. (epoksymetano) = epoksy + metano = -O-CH_2-.

P-25.4.1.6 Biwalencyjny mostek. Mostek połączony pojedynczymi wiązaniami z dwoma różnymi pozycjami skondensowanego układu pierścieni lub mostkowego skondensowanego układu pierścieni. Wszystkie mostki opisane w P-25.4.2.1 są prostymi mostkami.

P-25.4.1.7 Poliwalencyjny mostek. Mostek połączony ze skondensowanym układem pierścieni trzema lub większą liczbą wiązań lub równoważnymi wiązaniami wielokrotnymi. Poliwalencyjne mostki można opisać jako kombinację dwóch prostych mostków biwalencyjnych. Poliwalencyjne mostki przyłączone do dwóch, trzech lub więcej pozycji skondensowanego układu pierścieni można dalej opisać jako bipodalne, tripodalne etc.

Przykłady:



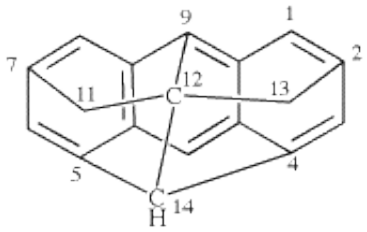
triwalencyjny mostek tripodalny

triwalencyjny mostek bipodalny

P-25.4.1.8 Niezależny mostek. Mostek łączący tylko dwie lub więcej pozycji skondensowanego układu pierścieni (patrz zależny mostek).

P-25.4.1.9 Zależny mostek. Mostek łączący jedną lub więcej pozycji skondensowanego układu pierścieni z jedną lub więcej pozycjami prostego lub złożonego niezależnego mostka, nie można go wyrazić jako części większego złożonego mostka.

Przykład:



4,5,12-epimetanotriylo-2,9,7-epipropano[1,2,3]triyloantracen (PIN)
(mostek epimetanotriyl C-14 jest mostkiem zależnym;
mostek epipropano[1,2,3]triyl w C-11 i C-13 jest mostkiem niezależnym (patrz P-25.4.3.2 – lokanty przyłączenia)

P-25.4.2 Nazwy mostków

Obszerna lista nazw mostków podana w publikacji o nomenklaturze pierścieni skondensowanych i mostkowych pierścieni skondensowanych (odn.4) została dokładnie przejrzana i zaktualizowana w kontekście zaleceń podanych w tym dokumencie. Większość zmian zachodzi w nazwach acyklicznych heteroatomowych mostków, zobacz P-25.4.2.1.4 i P-24.4.2.2.1. Użycie nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu do nazywania mostków patrz P-25.5.1.2.

P-25.4.2.1 Biwalencyjne mostki

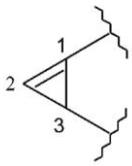
P-25.4.2.1.1 Biwalencyjny acykliczny mostek węglowodorowy wskazuje się przedrostkiem wywodzącym się z nazwy odpowiedniego nierozgałęzionego węglowodoru, do której dodaje się literę ‘o’. Lokant podwójnego wiązania, o ile występuje, podaje się w kwadratowym nawiasie umieszczonym w przedrostku pomiędzy nazwą węglowodoru i końcówką ‘eno’; ten lokant nie jest lokantem w finalnym numerowaniu mostkowego skondensowanego układu pierścieni (patrz P-25.4.4). Jeżeli istnieje możliwość wyboru, preferowane są niskie lokanty (np., prop[1]eno a nie prop[2]eno).

Przykłady:

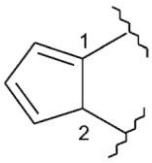
$-CH_2-$	metano (preferowany przedrostek)
$-CH_2\text{-}CH_2-$	etano (preferowany przedrostek)
$-CH_2\text{-}CH_2\text{-}CH_2-$	propano (preferowany przedrostek)
$-CH{=}CH-$	eteno (preferowany przedrostek)
$-\overset{1}{C}H{=}\overset{2}{C}H\text{-}\overset{3}{C}H_2-$	prop[1]eno (preferowany przedrostek)
$-\overset{1}{C}H{=}\overset{2}{C}H\text{-}\overset{3}{C}H_2\text{-}\overset{4}{C}H_2-$	but[1]eno (preferowany przedrostek)
$-\overset{1}{C}H_2\text{-}\overset{2}{C}H{=}\overset{3}{C}H\text{-}\overset{4}{C}H_2-$	but[2]eno (preferowany przedrostek)
$-\overset{1}{C}H{=}\overset{2}{C}H\text{-}\overset{3}{C}H{=}\overset{4}{C}H-$	buta[1,3]dieno (preferowany przedrostek)

P-25.4.2.1.2 Biwalencyjny monocykliczny mostek węglowodorowy inny niż benzen nazywa się takim samym przedrostkiem jak używany dla przedrostków kondensacji (P-25.3.2.2). Aby je rozróżnić przed nazwą mostka dodaje się przedrostek ‘epi’; końcowe ‘i’ usuwa się przed literami ‘i’ i ‘o’ kolejnego członu nazwy[CAS stosuje pisany kursywą przedrostek ‘*endo*’]. Przyjmuje się, ze mostek zawiera maksymalną liczbę nieskumulowanych wiązań podwójnych zgodnie z jego połączeniami z układem pierścieni skondensowanych lub z innymi mostkami. Pozycje wolnych wiązalności mostka wskazuje się lokantami w kwadratowych nawiasach umieszczanymi bezpośrednio przed nazwą mostka; te lokanty nie są używane dla atomów mostka w finalnej strukturze, patrz P-25.4.4. Lokanty wskazanego atomu wodoru, o ile taki występuje, znajdują się w nazwie finalnej struktury i wymienia się je bezpośrednio przed pełną nazwą (patrz P-25.4.3.4.1).

Przykłady:



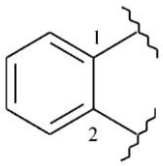
[1,3]epicyklopropa (preferowany przedrostek)
['epicyklopropa' w odn.4, FR 8.3.1(b)]



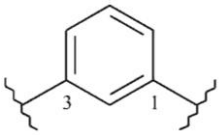
[1,2]epicyklopenta (preferowany przedrostek)

P-25.4.2.1.3 Biwalencyjne cykliczne węglowodorowe mostki nie nazwane w P-25.4.2.1.2 wskazuje się przedrostkami utworzonymi z nazw odpowiadających im węglowodorów przez dodanie do nazwy litery 'o'. Jeżeli nazwa mostka jest taka sama jak nazwa przedrostka skondensowania, do przedrostka mostka dodaje się 'epi' [CAS stosuje pisane kursywą '*endo'*]. Końcowe 'i' usuwa się przed samogłoską. Lokanty dla pozycji wolnych wiązalności i, w razie potrzeby, wskazanego atomu wodoru wymienia się w nazwie tak, jak opisano w P-25.4.2.1.2.

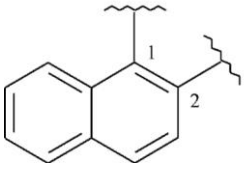
Przykłady:



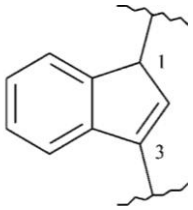
[1,2]benzeno (preferowany przedrostek)
(nie [1,2]epibenzo; benzo jest przedrostkiem skondensowania)



[1,3]benzeno (preferowany przedrostek)
(nie[1,3]epibenzo; benzo jest przedrostkiem skondensowania)



[1,2]naftaleno (preferowany przedrostek)
(nie [1,2]epinafto; nafto jest przedrostkiem skondensowania)



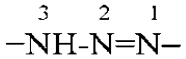
[1,3]epindeno (preferowany przedrostek)
(nie [1,3]indeno; indeno jest przedrostkiem skondensowania)

P-25.4.2.1.4 Biwalencyjny acykliczny homogeniczny mostek heteroatomowy wskazuje się przedrostkiem utworzonym w oparciu o przedrostek podstawnikowy lub nazwę odpowiedniego wodorku macierzystego. Przedrostki nazw mostków bazujące na przedrostkach podstawnikowych, używane obecnie lub zalecane poprzednio, wyróżnia przedrostek 'epi' (lub 'ep' przed literami 'i' lub 'o' w następnym członie). Nazwy mostków bazujące na nazwie macierzystego wodorku są takie same jak przedrostki acyklicznych węglowodorowych mostków (patrz P-25.4.2.1.1). Heteroatomy o niestandardowych wiązalnościach nazywa się konwencją λ (patrz P-14.1).

Następujące nazwy zaleca się jako wstępnie wybrane (patrz P-12.2) przedrostki dla mostków: ‘sulfano’, −S− ; ‘disulfano’, −SS−; ‘selano’, −Se−; ‘tellano’, −Te−; ‘azano’, −NH−; ‘diazeno’, −N=N−; ‘epitriazano’, −NH-NH-NH− i −NH-N=N−, ‘epitriaz[1]eno’. Jak pokazano w kolejnych przykładach przedrostki dla mostków ‘epitio’, ‘epiditio’, ‘episeleno’, ‘epitelluro’ i ‘epimino’ [odn, 4, FR-8.3.1(d)] mogą być używane w ogólnej nomenklaturze.

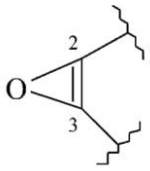
Przykłady:

−O−	epoksy (wstępnie wybrany przedrostek) (nie epoksydano)
−O-O−	epidioksy (wstępnie wybrany przedrostek) (nie epiperoksy)
−O-O-O−	epitrioksy [wstępnie wybrany przedrostek, patrz. odn.4,FR-8.3.1(d)] epitrioksydanodiyl
−S−	sulfano (wstępnie wybrany przedrostek) epitio [patrz odn.4, FR-8.3.1(d)]
$-SH_2-$	λ^4-sulfano (wstępnie wybrany przedrostek)
−SS−	disulfano (wstępnie wybrany przedrostek) epiditio [patrz odn.4, FR-8.3.1(d)]
−Se−	selano (wstępnie wybrany przedrostek) episeleno [patrz odn.4, FR-8.3.1(d)]
−Te−	tellano (wstępnie wybrany przedrostek) epitelluro [patrz odn.4, FR-8.3.1(d)]
$-SiH_2-$	silano (wstępnie wybrany przedrostek)
$-SnH_2-$	stannano (wstępnie wybrany przedrostek)
−NH−	azano (wstępnie wybrany przedrostek) epimino [patrz odn.4, FR-8.3.1(d)] (nie imino jak w odn.1, C-815.2)
−NH-NH−	diazano (wstępnie wybrany przedrostek) biimino (patrz odn. 2, R-9.2.1.4)
−N=N−	diazeno [wstępnie wybrany przedrostek, patrz odn.4, FR-8.3.1(d)] azo (patrz odn.1, B-15.2)
−NH-NH-NH−	epitriazano (wstępnie wybrany przedrostek) (nie triazano używane dla NH_2-NH-NH−, patrz odn.1, C-942.3, w tych zaleceniach triazan-1-yl, patrz P-68.3.1.4.1)

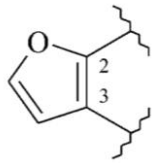
	epitriaz[1]eno (wstępnie wybrany przedrostek) (nie triaz[1]eno używane dla NH_2-N=N−, patrz patrz odn.1, C-942.3, w tych zaleceniach triaz-1-en-1-yl, patrz P-68.3.1.4.1) azoimino (patrz odn. 1,B-15.2)
−PH−	fosfano (wstępnie wybrany przedrostek)
−BH−	borano (wstępnie wybrany przedrostek)

P-25.4.2.1.5 Biwalencyjny heterocykliczny mostek wskazuje się przedrostkiem utworzonym z nazwy odpowiedniego związku heterocyklicznego dodając końcówkę ‘o’ z usunięciem, o ile była obecna, litery końcówki ‘a’. Jeżeli układ heterocykliczny wymaga stosowania lokantów, podaje się je w nawiasie kwadratowym bezpośrednio przed przedrostkiem. Jeżeli nazwa mostka jest taka sama jak przedrostka skondensowania, do nazwy mostka dodaje się przedrostek ‘epi’ (lub ‘ep’, jeżeli po nim następuje ‘i’ lub ‘o’) [CAS stosuje pisany kursywą przedrostek ‘*endo*’] Jeżeli dla nazwy mostka wymagany jest wskazany atom wodoru, wymienia się go przed kompletną nazwą mostkowego skondensowanego układu pierścieni a nie przed nazwą mostka (patrz P-25.4.3.4.1). Numerowanie mostków patrz P-25.4.4.

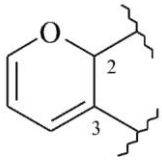
Przykłady:



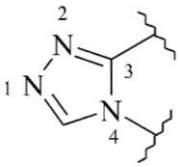
epoksyreno (preferowany przedrostek)



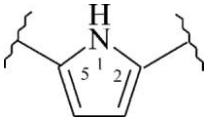
[2,3]furano (preferowany przedrostek)
(nie [2,3]epifurano ani [2,3]epifuro)



[2,3]epipirano (preferowany przedrostek)



[3,4]epi[1,2,4]triazolo (preferowany przedrostek)



[2,5]epipirolo ((preferowany przedrostek)

P-25.4.2.2 Poliwalencyjne mostki

P-25.4.2.2.1 Poliwalencyjny mostek zbudowany z jednego atomu (innego niż atom wodoru) wskazuje się przedrostkiem utworzonym z przedrostka podstawnikowego z dodatkiem przedrostka ‘epi’ jak opisano w P-25.4.2.1.4 lub zmieniając końcówkę 'ano' w nazwie biwalencyjnego jednoatomowego mostka opisanego w P-25.4.2.1.4 na 'eno', na przykład 'meteno' z 'metano'. W nazwach skondensowanych układów mostkowych poliwalencyjne mostki są zamykane w nawiasach, dla przypomnienia w przykładach poniżej nazwy mostków podane są w nawiasach. Jeżeli istnieje wybór, przyłączenie pojedynczym wiązaniem to jest '-yl' oznacza się niższym lokantem w macierzystym układzie pierścieni. ‘epi’ patrz P-25.4.2.1.4.

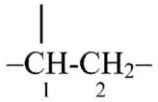
Przykłady:

−CH=	(meteno) (preferowany przedrostek) (epimetanyloyliden)
–CH–	(epimetanotriyl) (preferowany przedrostek) (metyno)
–C=	(epiepimetanodiyloyliden) (preferowany przedrostek
−N=	(azeno) (wstępnie wybrany przedrostek) (epiazanyloyliden) (nie 'nitrylo' patrz odn.2, R-9.2.2)
−Si−	(episilanotetraylo) (wstępnie wybrany przedrostek)
–N–	(epinitrylo) (wstępnie wybrany przedrostek)
−P=	(fosfeno) (wstępnie wybrany przedrostek) (epifosfanyloyliden, odn. 4, FR-8.3.1(d)]
–P–	(epifosfanotriyl) (wstępnie wybrany przedrostek) (nie fosfanotriyl, odn. 4, FR-8.3.1(d); ani fosfinidyn]

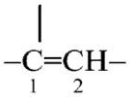
P-25.4.2.2.2 Poliwalencyjny poliatomowy mostek nazywa się tak jak poliwalencyjny przedrostek i tę nazwę zamyka się w nawiasie (dla przypomnienia, podane niżej nazwy mostków też zamknięte są w nawiasach). W razie potrzeby pozycje wolnych wiązalności wskazuje się odpowiednimi lokantami umieszczonymi bezpośrednio przed właściwą końcówką. Przyrostek ‘yliden’ jest ograniczony do sytuacji, gdy mostek związany jest podwójnym wiązaniem z układem skondensowanym. Jeżeli możliwy jest wybór sposobu numerowania mostka, pierwszeństwo ma (a) przyrostek '-yl'; (b) przyrostek ‘yliden’ i (c) podwójne wiązania. ‘epi’ patrz P-25.4.2.1.4.

Przykłady:

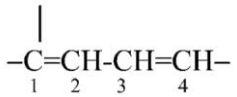
$-CH_2-CH=$	(epietanyliden) (preferowany przedrostek)



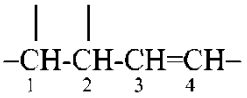
(epietano[1,1,2]triyl) (preferowany przedrostek)



(epieteno[1,1,2]triyl) (preferowany przedrostek)

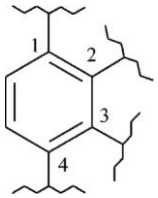


(epibuta[1,3]dieno[1,1,4]triyl) (preferowany przedrostek)



(epibut[3]eno[1,1,2,4]tetrayl) (preferowany przedrostek)

=N-N= (epidiazenodiyliden) (wstępnie wybrany przedrostek)



(epibenzeno[1,2,3,4]tetrayl) (preferowany przedrostek)

P-25.4.2.3 Złożone mostki

P-25.4.2.3.1 Nazwy złożonych mostków tworzy się łącząc nazwy dwu lub więcej prostych mostków. O ile nie występuje na początku, przedrostek ‘epi’ (lub ‘ep’ przed literami 'i' i ‘o’) pomija się. Przedrostki wymienia się nie usuwając końcowych samogłosek w kolejności od starszego przedrostka, stosując poniższe kryteria aż do ostatecznej decyzji.

(a) (a) prosty mostek zwierający heteroatom pojawiający się wcześniej na liście: O > S > Se > Te >N > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al > Ga > In > Tl;
(b) prosty mostek zawierający starszy układ pierścieni;
(c) prosty mostek zawierający dłuższy łańcuch;
(d) prosty mostek, którego nazwa występuje wcześniej w kolejności alfabetycznej.

P-25.4.2.3.2 W nazwach mostkowych związków skondensowanych nazwy złożonych mostków zamyka się w nawiasie (dla przypomnienia, nazwy mostków w poniższych przykładach podane są w nawiasach). Lokanty wskazanych atomów wodoru wymagane dla cyklicznego komponentu złożonego mostka wymienia się przed kompletną nazwą mostka (patrz P-25.7.1). Numerowanie mostków patrz P-25.4.4). Jeżeli komponent acyklicznego mostka wymaga wewnętrznego numerowania to kierunek tego numerowania wyznacza nazwa mostka.

Przykłady:

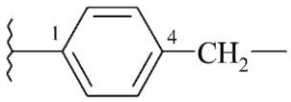
$-O-CH_2-$ (epoksymetano) (preferowany przedrostek)

−NH-CH_2-CH_2− (azanoetano) (preferowany przedrostek)

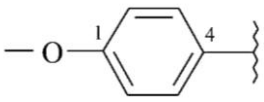
−O-S-O− (epoksysulfanooksy) (preferowany przedrostek)

−O-CH(|)-CH_2- (epoksyetano[1,2]diyl) (preferowany przedrostek)

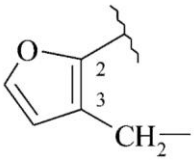
−O-CH(|)-CH< (epoksyetano[1,2,2]triyl) (preferowany przedrostek)



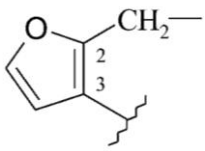
([1,4]benzenometano) (preferowany przedrostek)



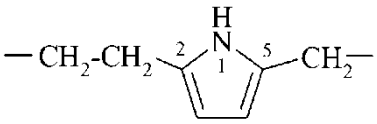
(epoksy[1,4]benzeno)(preferowany przedrostek)



([2,3]furanometano) (preferowany przedrostek)



([3,2]furanometano) (preferowany przedrostek)



[etano([2,5]epipirolo)metano] (preferowany przedrostek)

−CH_2-O-CH= (metanooksymeteno) (preferowany przedrostek)

P-25.4.3 Nazywanie mostkowych skondensowanych układów pierścieni

P-25.4.3.1 Wymienianie mostków
P-25.4.3.2 Dołączanie lokantów
P-25.4.3.3 Wybór dołączania lokantów
P-25.4.3.4 Wybieranie mostków

P-25.4.3.1 Wymienianie mostków

Jeżeli jest więcej niż jeden mostek, wymienia się je alfabetycznie, o ile jeden mostek nie jest zależny od drugiego. W takim przypadku zależny mostek wymienia się bezpośrednio przed niezależnym mostkiem. Dwa lub więcej identycznych mostków wskazuje się przedrostkami zwielokrotniającymi ‘di’, ‘tri’ etc. w przypadku prostych mostków (P-25.4.1.4) lub ‘bis’, ‘tris’etc. dla złożonych mostków (P-24.4.1.5) lub gdy ‘di’, ‘tri’ etc. byłyby niejednoznaczne. Pary lokantów identycznych mostków oddziela się dwukropkiem.

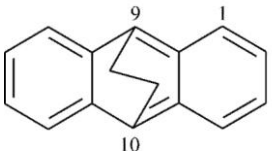
P-25.4.3.2 Lokanty dołączania

Układ skondensowanych pierścieni, do którego dołącza się mostek, numeruje się w zwykły sposób. Układy skondensowanych pierścieni do mostkowania patrz P-25.4.3.4.2.

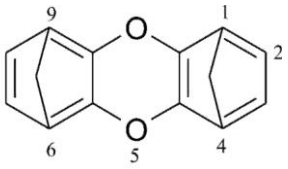
P-25.4.3.2.1 Biwalencyjne symetryczne mostki

W układzie pierścieni skondensowanych lokanty pozycji, do których dołączony jest biwalencyjny mostek wymienia się w porządku liczbowym przed nazwą mostka.

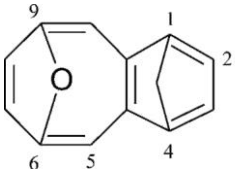
Przykłady:



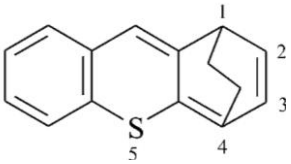
9,10-etanoantracen (PIN)



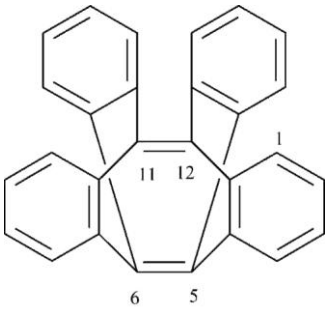
1,4:6,9-dimetanooksoantren (PIN)
1,4:6,9-dimetanodibenzo[*b*,*e*]dioksyna



6,9-epoksy-1,4-metanobenzo[8]annulen (PIN)
6,9-epoksy-1,4-metanobenzocyklookten



1*H*-1,4-etanotioksantren (PIN)

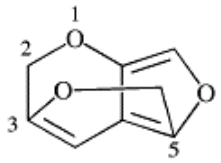


5,12:6,11-di[1,2]benzenodibenzo[*a*,*e*][8]annulen (PIN)

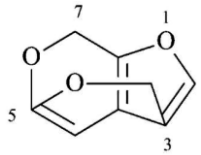
P-25.4.3.2.2 Mostki poliwalencyjne i złożone

W układzie pierścieni skondensowanych, do których przyłączone są mostki poliwalencyjne lub złożone, lokanty pozycji wymienia się w kolejności wskazanej lub sugerowanej nazwą mostka. Metody przypisywania lokantów dla wolnych wiązalności w mostkach podane są w P-25.4.2. Jeżeli nie ma specyficznych lokantów, pojedynczej wolnej wiązalności (yl) nadaje się lokant niższy niż podwójnej wolnej wiązalności (yliden). Jeżeli istnieje wybór, lokanty wymienia się w porządku numerycznym. Wskazane atomy wodoru wymienia się przed kompletną nazwą mostkowego układu pierścieni a nie przed nazwą mostka (P-25.7.1).

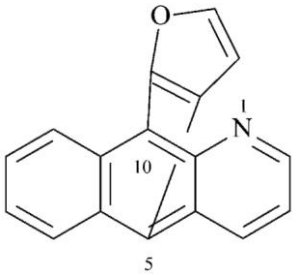
Przykłady:



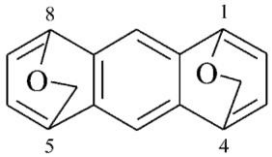
2*H*-3,5-(epoksymetano)furo[3,4-*b*]piran (PIN)
(nie 7*H*-3,5-(epoksymetano)furo[2,3-*c*]piran)



7*H*-5,3-(epoksymetano)furo[2,3-*c*]piran



10,5-[2,3]furanobenzo[g]chinolina (PIN)



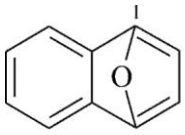
1,4:8,5-bis(epoksymetano)antracen (PIN)

P-25.4.3.3 Wybór lokantów dołączania

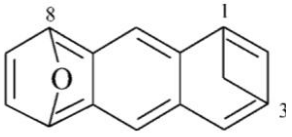
Jeżeli po zastosowaniu P-25.4.3.2 istnieje wybór lokantów dołączania, starszeństwo ustala się w następującej kolejności:

(a) niższy zestaw lokantów wśród wszystkich punktów dołączenia mostków traktowanych jako zestaw;

Przykłady:



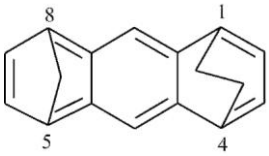
1,4-epoksynaftalen (PIN)
(nie 5,8-epoksynaftalen)



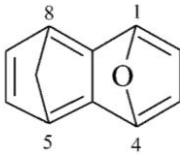
5,8-epoksy-1,3-metanoantracen (PIN)
(nie 1,4-epoksy-5,7-metanoantracen;
zestaw lokantów 1,3,5,8 jest niższy od 1,4,5,7)

(b) niższe lokanty w kolejności wymieniania mostków;

Przykłady:



1,4-etano-5,8-metanoantracen (PIN)



1,4-epoksy-5,8-metanonaftalen (PIN)

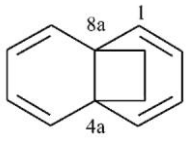
P-25.4.3.4 Wybieranie mostków

Gdy policyklicznego układu pierścieni nie można nazwać w całości jako układu pierścieni skondensowanych, rozważa się możliwe sposoby nazwania go jako mostkowego układu skondensowanego. Mostki wybiera się tak, że zalecany układ pierścieni skondensowanych, jak opisano w P-25.1 do P-25.3, staje się macierzystym układem pierścieni skondensowanych do mostkowania.

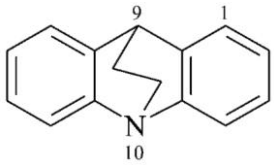
P-25.4.3.4.1 Nazywanie układów *orto*- oraz *orto*- i *peri*-skondensowanych

Układ pierścieni, który pozostanie po usunięciu mostka (mostków) nazywa się według reguł przedstawionych w P-25.1 do P-25.3. Po wprowadzeniu mostka układowi pierścieni skondensowanych przypisuje się maksymalną liczbę nieskumulowanych wiązań podwójnych. Wobec tego po uwzględnieniu wiązań mostka lokanty nieskumulowanych wiązań podwójnych i/lub potrzeba wprowadzenia wskazanego atomu wodoru mogą być inne niż w macierzystym układzie pierścieni. W razie potrzeby, wskazany atom wodoru mogący zidentyfikować określony izomer wymienia się przed pełną nazwą mostkowego układu skondensowanego (patrz P-25.7.1.3.2).

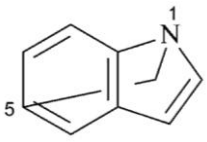
Przykłady:



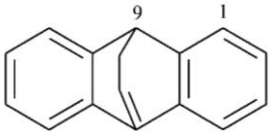
4a,8a-etanonaftalen (PIN)



9*H*-9,10-etanoakrydyna (PIN)



1,5-metanoindol (PIN)



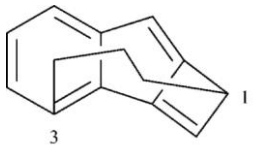
9*H*-9,10-(epietanyloylideno)antracen (PIN)
[nie 9*H*-10,9-(epietanyloylideno)antracen; przyrostek ‘-yl’ ma pierwszeństwo w wyborze lokantu przyłączenia do układu pierścieni (patrz P-25.4.3.2.2)

P-25.4.3.4.2 Wybór układu skondensowanych pierścieni do mostkowania

Jeżeli istnieje możliwość wyboru układu skondensowanych pierścieni do mostkowania, stosuje się poniższe kryteria aż do podjęcia decyzji. Dwie struktury mogą różnić się w rozkładzie podwójnych wiązań, jak opisano w P-25.4.3.4.1. Lokanty układu pierścieni skondensowanych z dołączonymi mostkami wymienia się przed nazwą mostka i w takiej samej kolejności jak lokanty wolnych wiązalności mostka (patrz P-25.4.3.2.2). Układ pierścieni skondensowanych przed mostkowaniem musi:

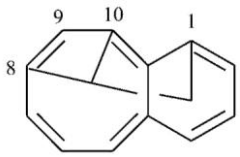
(a) zawierać jak najwięcej pierścieni;

Przykłady:



(**I**)

nie



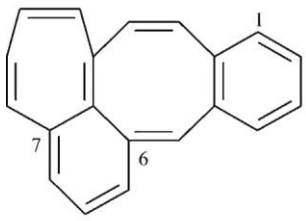
(**II**)

1*H*-1,3-propanocyklobuta[*a*]inden (**I**) (PIN)
[nie 8,10,1-(epietano[1,1,2]triylo)benzo(8)annulen (**II**)
(kolejność lokantów przyłączania pierścieni patrz P-25.4.3.2.2)]

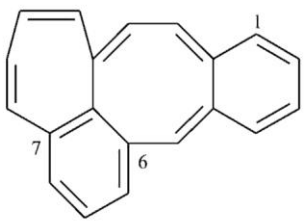
Wyjaśnienie: Właściwa nazwa ma trzy pierścienie w układzie skondensowanym, a niewłaściwa nazwa ma tylko dwa pierścienie w układzie skondensowanym

(b) zawierać jak najwięcej atomów szkieletu

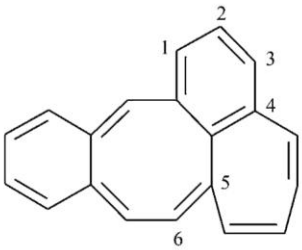
Przykład:



I



II

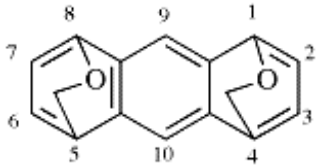


III

6,7-(epiprop[1]en[1]yl[3]ylideno)benzo[*a*]cyklohepta[*e*][8]annulen (**I**) (PIN)
[nie 7,6-(epiprop[1]en[1]yl[3]ylideno)benzo[*a*]cyklohepta[*e*][8]annulen (**II**);
przyrostek '-yl' ma niższy lokant punktu przyłączenia układu pierścieni (patrz P-25.4.3.2.2)
[nie 4,5-buta[1,3]dienodibenzo[*a*,d][8]annulen (**III**); skondensowany układ pierścieni benzo[*a*]cyklohepta[*e*][8]annulen ma 17 atomów a skondensowany układ dibenzo[*a*,d][8]annulen ma tylko 16 atomów]

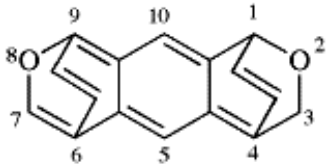
(c) mieć mniej heteroatomów w układzie pierścieni skondensowanych przed mostkowaniem;

Przykład:



(I)

nie



(II)

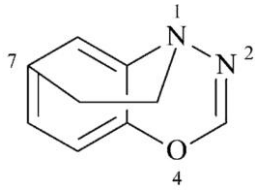
1,4:8,5-bis(epoksymetano)antracen **(I)** (PIN)

[nie 1*H*,3*H*-1,4:6,9-bisetenobenzo=[1,2-*c*:5,4- *c*′]dipiran (**II**)

[nie 1,4:6,9-dimetanooksantren; zero hetetoatomów w układzie skondensowanych pierścieni przed mostkowaniem to mniej niż dwa]

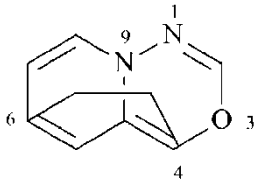
(d) zawierać starszy układ pierścieni, jeżeli reguły starszeństwa zastosować do macierzystych układów pierścieni skondensowanych (patrz P-44.2);

Przykłady:



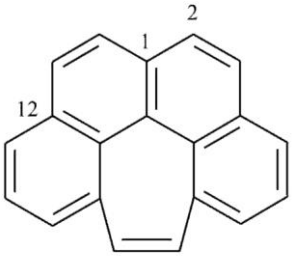
(I)

nie



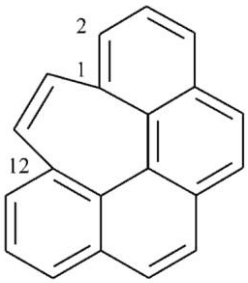
(II)

1,7-etano[4,1,2]benzooksadiazyna (**I**) (PIN)
[nie 4,6-etanopirydo[1,2-*d*][1,3,4]oksadiazyna (**II**);
zestaw lokantów ‘1,2,4’ dla heteroatomów w (**I**) jest niższy od zestawu lokantów ‘1,3,4’ w (**II**) (patrz P-14.3.5)]



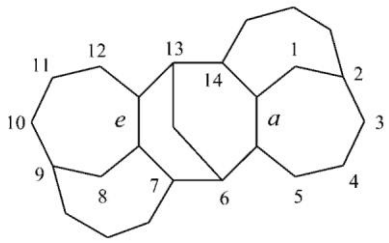
(I)

nie



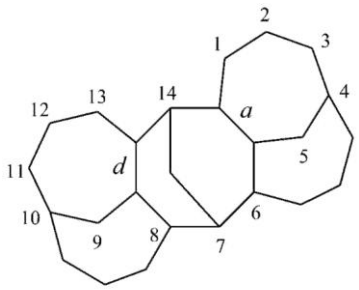
(II)

1,12-etenobenzo[4,5]cyklohepta[1,2,3-*de*]naftalen (**I**) (PIN)
{nie 1,12-etenobenzo[*c*]fenantren (**II**); zestaw wielkości pierścieni ‘7,6,6,6’ w (**I**) jest preferowany względem zestawu wielkości pierścieni ‘6,6,6,6’ w (**II**) [patrz P-25.3.2.4(c) i P-44.2.2.2.3 (a)]}



(I)

nie

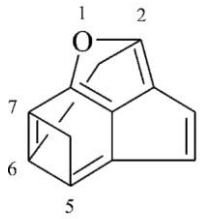


(II)

oktadekahydro-6,13-metano-2,14:7,9-dipropanodicyklohepta[*a*,*e*][8]annulen (**I**) (PIN)
{nie oktadekahydro-7,14-metano-4,6:8,10-dipropanodicyklohepta[*a*,*d*]annulen (**II**); w prawidłowo tworzonej nazwie więcej pierścieni układu pierścieni skondensowanych do mostkowania leży w poziomym rzędzie, '3'versus '2' [patrz P-25.3.2.3.2(a) i P-44.2.2.2.3 (b)}
heksacyklo[15.3.2.$2^{3,7}$,$1^{2,12}$,$0^{13,21}$,$0^{11,25}$]pentakozan (patrz P-23.2.6.3)

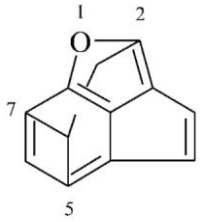
(e) mieć jak najmniej poliwalencyjnych mostków

Przykłady:



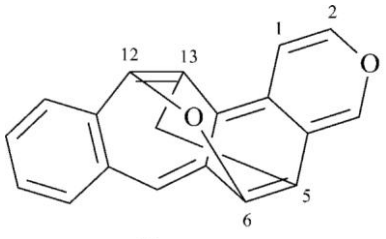
(I)

nie



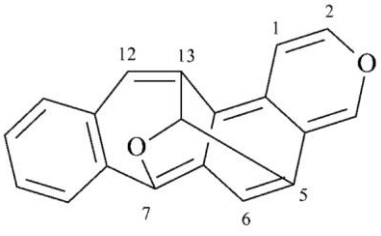
(II)

2,6:5,7-dimetanoindeno[7,1-*bc*]furan (**I**) (PIN) (kolejność lokantów przyłączenia pierścieni patrz P-25.4.3.2.2)
[nie 5,7,2-(epietano[1,1,2]triylo)indeno[7,1-*bc*]furan (**II**); PIN (**I**) nie ma poliwalencyjnych mostków; niewłaściwa nazwa (**II**) ma jeden taki mostek]



(I)

nie

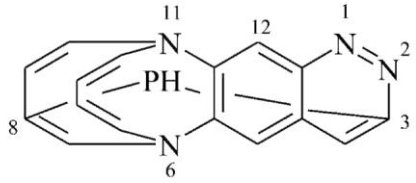


(II)

6,12-epoksy-5,13-metanobenzo[4,5]cyklohepta[1,2-*f*][2]benzopiran (**I**) (PIN)
6,12-epoksy-5,13-metanobenzo[4,5]cyklohepta[1,2-*f*][2]izochromen
(kolejność lokantów przyłączenia pierścieni patrz P-25.4.3.2.2)
[nie 7,5,13-(epoksyepimetanotriylo)benzo[4,5]cyklohepta[1,2-*f*]isochromen (**II**); PIN (**I**) nie ma poliwalencyjnych mostków; niewłaściwa nazwa (**II**) ma jeden taki mostek]

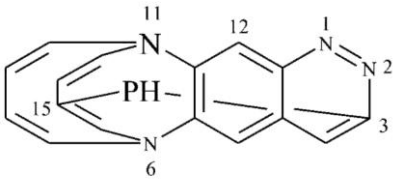
(f) mieć jak najmniejszą liczbę zależnych mostków;

Przykłady:



(I)

nie

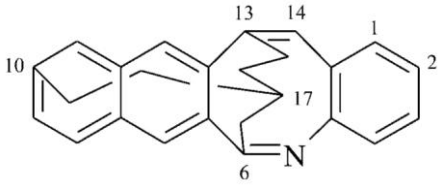


(II)

6,11-buta[1,3]dieno-3,8-fosfano[1,4]diazocyno[2,3-*g*]cynnolina (**I**) (PIN)
[nie 3,15-fosfano-6,11-buta[1,3]dieno[1,4]diazocyno[2,3-*g*]cynnolina (**II**);
PIN (**I**) nie ma zależnego mostka; niewłaściwa struktura (**II**) ma jeden taki mostek]

(g) mieć jak najmniej atomów w zależnych mostkach;

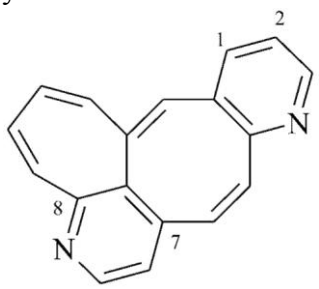
Przykład:



6,17-metano-10,13-pentanonafto[2,3-*c*][1]azocyn (PIN)
[nie 13,17-etano-6,10-butanonafto[2,3-*c*][1]benzoazocyn ani
10,17-etano-6,13-butanonafto[2,3-*c*][1]benzoazocyn; PIN ma
tylko jeden atom w zależnym mostku]

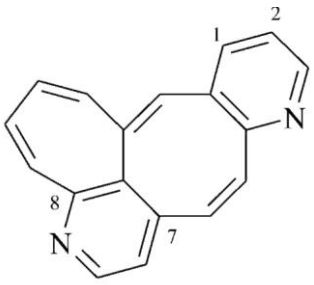
(h) mieć jak najwięcej biwalencyjnych mostków; czyli ‘diyl’jest starszy od ‘ylyliden’, ‘triyl’, ‘diyliden’, ‘diylyliden’ czy ‘tetrayl’. Podobnie ‘ylyliden’jest starszy od ‘triyl’.

Przykład:



(I)

nie

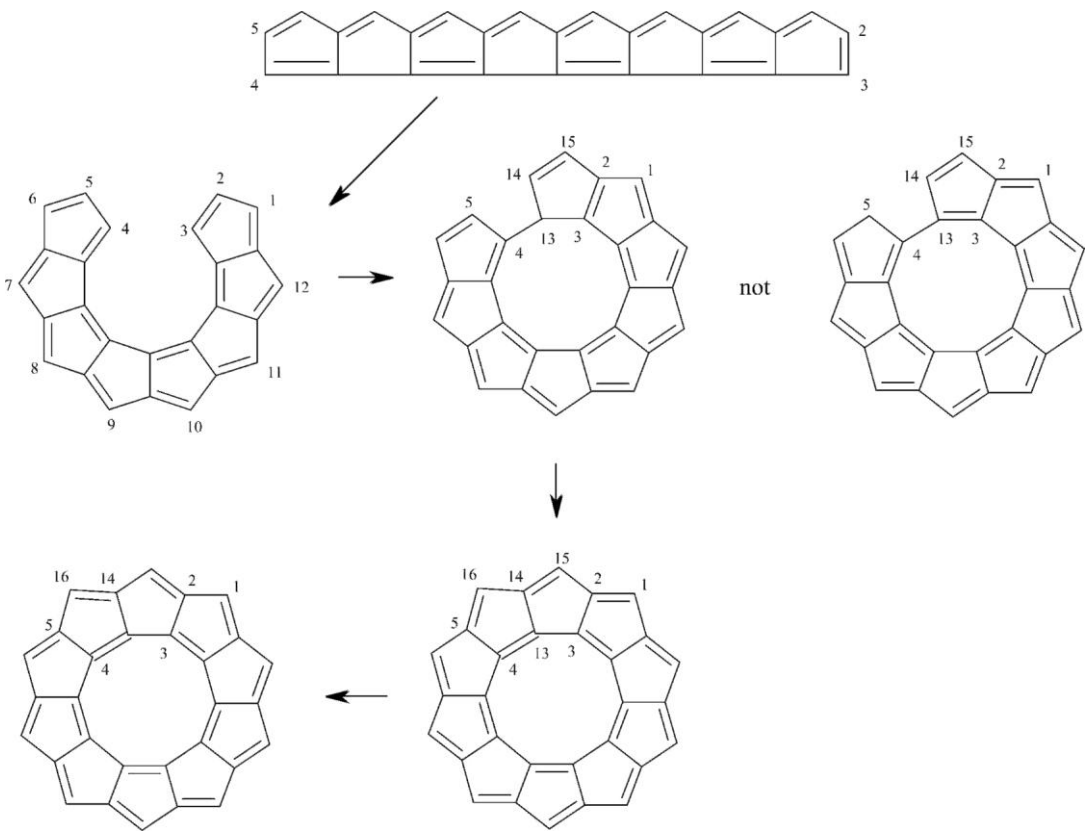


(II)

8,7-(azenoeteno)cyklohepta[4,5]cyklookta[1,2-*b*]pirydyna (**I**) (PIN)
[8,7-(azenoepietanodiylideno)cyklohepta[4,5]cyklookta[1,2-*b*]pirydyna (**II**);
(PIN ma złożony mostek składający się z triwalencyjnego mostka i diwalencyjnego mostka, podczas gdy niewłaściwa nazwa ma złożony mostek zbudowany z triwalencyjnego mostka i tetrawalencyjnego mostka.

(i) mieć najniższe lokanty rozmieszczenia mostków, najpierw niezależnych, później zależnych

Przykład:



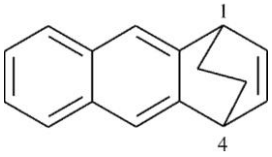
5,14 (meteno)-2,3,4-(epiprop[2]eno[1,3]diylo[1]ylideno)dicyklopenta[*f*,*f*′]pentaleno[1,2-*a*:6,5-*a*′]dipentalen (PIN); pojedyncze wiązanie grupy 'meteno' ma pierwszeństwo niższego lokantu w układzie pierścieni (patrz P-25.4.3.2.2)

[nie 5,14-(meteno)-2,4,3-(epiprop[2]eno[1,3]diyl[1]yliden)dicyklopenta[*f*,*f*′]pentaleno[1,2-*a*:6,5-*a*′] dipentalen (lokanty ‘2,3,4’ dla niezależnych mostków są niższe od ‘2,4,3’)]

[nie 14,5-(meteno)-2,3,4-(epiprop[2]eno[1,3]diyl[1]yliden)dicyklopenta[*f*,*f*′]pentaleno[1,2-*a*:6,5-*a*′] dipentalen (lokanty ‘5,14’ dla niezależnych mostków są niższe od ‘14,5’)]

(j) mieć najwięcej nieskumulowanych wiązań podwójnych w macierzystym układzie pierścieni;

Przykład:

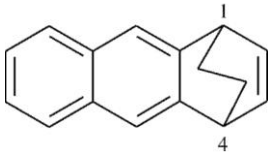


1,4-dihydro-1,4-etanoantracen (PIN)
(nie 1,2,3,4-tetrahydro-1,4-etanoantracen)

P-25.4.4 Numerowanie atomów mostka

Atomy mostka numeruje się rozpoczynając od najwyższego lokantu układu pierścieni skondensowanych. Jeżeli w mostku jest więcej niż jeden atom (wykluczając atom wodoru) numerowanie rozpoczyna się na końcu łańcucha lub od atomu połączonego z pozycją przyczółkową o najwyższym lokancie w układzie pierścieni skondensowanych. W przypadku złożonych mostków, każdy składnik musi być ponumerowany całkowicie przed rozpoczęciem numerowania kolejnego składnika. Atomy skondensowania w mostkach pierścieni skondensowanych numeruje się zgodnie z P-25.3.3.1.1.

Przykład:



1,4-etanonaftalen (PIN)

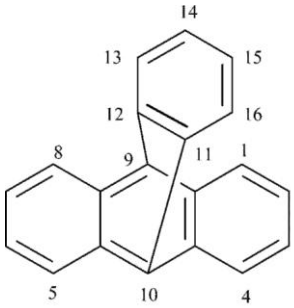
P-25.4.4.1 Jeżeli istnieje wybór lokantów, najniższe lokanty przypisuje się rozpatrując kolejno podane niżej kryteria aż do podjęcia ostatecznej decyzji:

(a) niskie lokanty dla heteroatomów

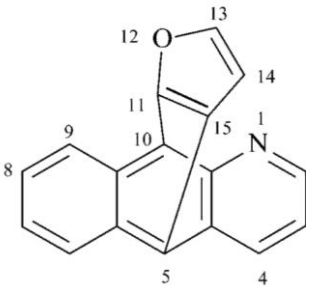
(b) niskie lokanty dla atomów przyczółkowych w mostku

Pozostałe atomy (za wyjątkiem atomów wodoru) numeruje się kolejno.

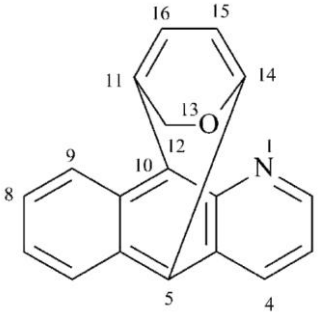
Przykłady:



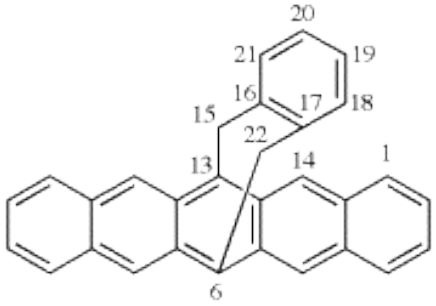
9,10-[1,2]benzenoantracen (PIN)



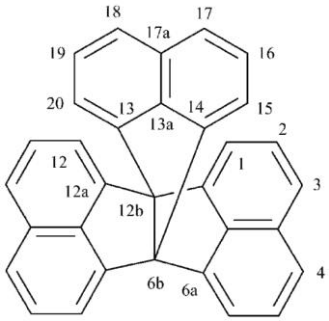
10,5-[2,3]furanobenzo[*g*]chinolina (PIN)



12*H*-5,10-[2,5]epipiranobenzo[*g*]chinolina (PIN)



6,13-(metano[1,2]benzenometano)pentacen (PIN)



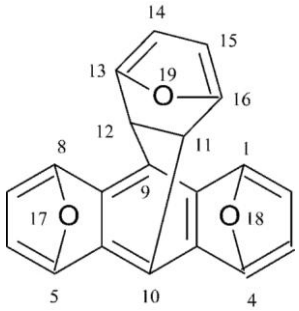
6b,12b-[1,8]naftalenoacenaftyleno[1,2-*a*]acenaftylen (PIN)

Uwaga: Lokanty 13a i 17a są generowane tak samo jak lokanty skondensowania w układach pierścieni skondensowanych bez mostków, patrz P-25.3.3.1.1.

P-25.4.5 Kolejność numerowania mostków

P-25.4.5.1 Niezależne mostki numeruje się przed mostkami zależnymi.

Przykłady:

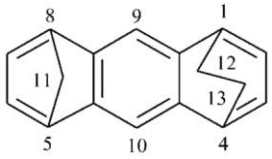


13,16-epoksy-1,4:5,8-diepoksy-9,10-[1,2]benzenoantracen (PIN)

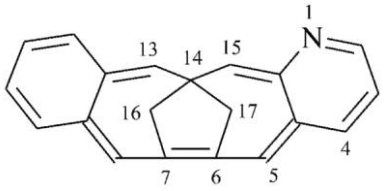
Uwaga: Zależne mostki wymienia się przed niezależnymi, ale numeruje po nich, patrz P-25.4.3.1

P-25.4.5.2 Jeżeli jest więcej niż jeden mostek tego samego rodzaju (zależny czy niezależny), pierwszeństwo daje się mostkowi dołączonemu do atomu przyczółkowego o wyższym lokancie w pierwszym miejscu różnicy.

Przykłady:



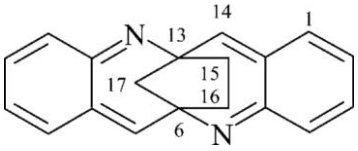
1,4-etano-5,8-metanoantracen (PIN)



6,14:7,14-dimetanobenzo[7,8]cykloundeka[1,2-*b*]pirydyna (PIN)

P-25.4.5.3 Jeżeli dwa mostki są przyłączone do tego samego atomu przyczółkowego, numeruje się je zgodnie z ich pierwszeństwem w wymienianiu.

Przykład:

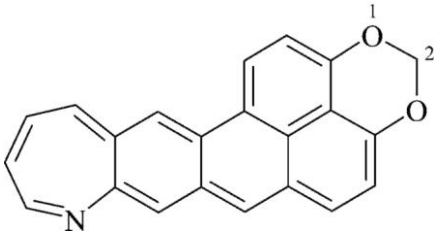


6,13-etano-6,13-metanodibenzo[*b*,*g*][1,6]diazecyn (PIN)

P-25.5 OGRANICZENIA NOMENKLATURY SKONDENSOWANEJ: TRZY KOMPONENTY *ORTO*- I *PERI*-SKONDENSOWANE RAZEM

Zasady kondensacji opisane w P-23 do P-25 stosują się tylko do par komponentów. Nie pozwalają na nazwanie układu, w którym trzeci kompotent byłby *orto*- i *peri*-dokondensowany do dwóch komponentów, nawet *orto*- i *peri*-skondensowanych. Warto sobie przypomnieć, że benzo heterocykle rozpatruje się jako jeden komponent, co pozwala tworzyć nazwy niedostępne w inny sposób.

Przykład:



2*H*-[1,3]benzodioksyno[6′,5′,4′:10,5,6]antra[2,3-*b*]azepin (PIN)

Uwaga: Zwykła nazwa skondensowana nie byłaby możliwa gdyby traktować indywidualnie wszystkie cztery komponenty: azepin, antracen, 1,3-dioksyn i benzen; wobec tego konieczne jest zastosowanie nazwy benzo; 1-benzazepin nie może być związkiem macierzystym, gdyż zniknąłby dołączony komponent mający zachowaną nazwę, antra, co nie jest dozwolone, patrz P-25.3.5.

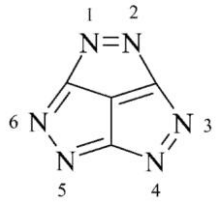
Kiedy trzeci komponent jest *orto*- oraz *orto*- i *peri*-skondensowany z dwoma komponentami, które same są *orto*- oraz *orto*- i *peri*-skondensowane stosuje sie podane niżej procedury do momentu, kiedy będzie można utworzyć nazwę.

P-25.5.1 Nomenklatura zamienna ‘a’ szkieletu

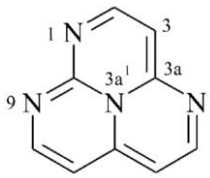
P-25.5.1.1 Jeżeli odpowiadający skondensowany układ węglowodorowy pierścieni można nazwać nomenklaturą skondensowaną lub gdy ma zachowaną nazwę, to heteroatomy wskazuje się stosując odpowiednie przedrostki ‘a’ (patrz P-22.2.3). Przedrostki ‘a’ nie zmieniają numerowania skondensowanego układu pierścieni.

Kiedy nie mają zastosowania zasady kondensacji omówione w P-25.1 do P-25.3, nie zaleca się stosowania zamiany ‘a’ szkieletu. Ta procedura odnosi się tylko do przypadków opisanych w P-25.5.

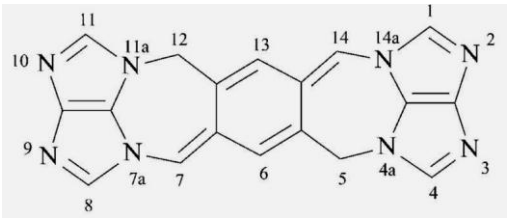
Przykłady:



1,2,3,4,5,6-heksazacyklopenta[*c*,*d*]pentalen [PIN]



1,3a^{1},4,9-tetraazafenalen (PIN)

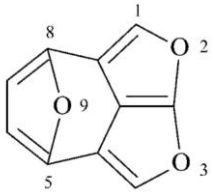


5*H*,12*H*-2,3,4a,7a,9,10,11a,14a-oktaazadicyklopenta[*ij*:*i′j′*]benzo[1,2-*f*:4,5-*f′*]diazulen (PIN)

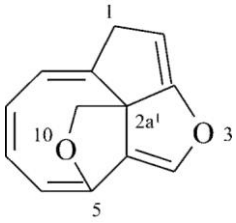
P-25.5.1.2 Jeżeli układ pierścieni skondensowanych można nazwać tylko stosując nomenklaturę zamienną ‘a’ szkieletu to każdy atom w mostku też nazywa się nomenklaturą zamienna ‘a’ szkieletu.

Człony zamienne wymienia się przed nazwą węglowodorowego mostkowego skondensowanego układu pierścieni.

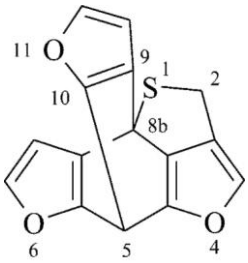
Przykłady:



2,3,9-trioksa-5,8-metanocyklopenta[*cd*]azulen (PIN)



1*H*-3,10-dioksa-2a^{1},5-etanocyklookta[*cd*]pentalen (PIN)

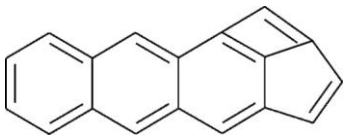


2*H*,5*H*-4,6,11-trioksa-1-tia-5,8b-[1,2]epicyklopentacyklopenta[*cd*]-*s*-indacen (PIN)

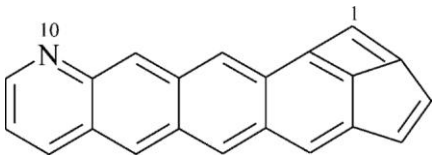
P-25.5.2 Wybór nie najstarszego macierzystego komponentu węglowodorowego

Nie najstarszy macierzysty komponent węglowodorowy wybiera sie wtedy, gdy umożliwi to utworzenie nazwy skondensowanej. Macierzyste komponenty drugiego i trzeciego wyboru wybiera się zgodnie z porządkiem starszeństwa do wytypowania najstarszego macierzystego komponentu (patrz P-25.3.2.4).

Przykłady:



cyklobuta[1,7]indeno[5,6-*b*]naftalen (PIN)
(antracen nie może być wybrany wodorkiem macierzystym;
następny w porządku starszeństwa do wyboru
macierzystego komponentu jest naftalen, a nie inden)



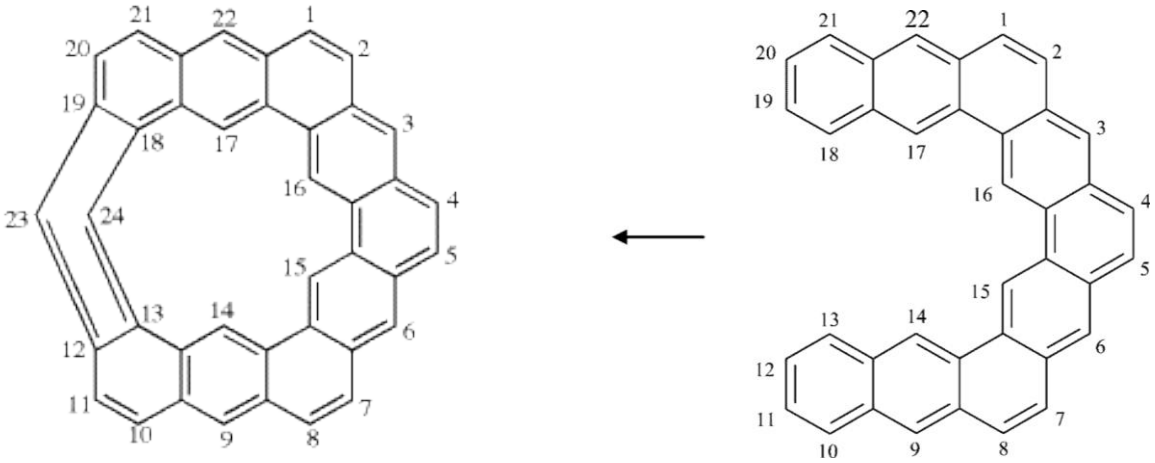
10-azacyklobuta[1,7]indeno[5,6-*b*]antracen (PIN)

[ani chinolina ani pirydyna nie mogą być starszymi komponentami ponieważ ani naftalen ani antracen nie mogą być starszymi dołączonymi komponentami; wobec tego należy zastosować nomenklaturę zamienną ‘a’ (patrz P-25.5.1) a ponieważ nie można użyć preferowanego węglowodoru tetracenu to następny starszy komponent, antracen, zostaje wybrany macierzystym komponentem]

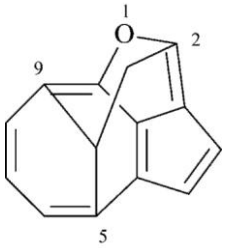
P-25.5.3 Użycie nomenklatury mostkowej

Mostkowe układy skondensowane (patrz P-25.4) stosuje się do tworzenia nazw dla struktur, których nie można nazwać normalną nomenklaturą skondensowaną. Najpierw należy wyobrazić sobie układ skondensowany; dodatkowe pierścienie tworzy się za pomocą mostków.

Przykłady:



12,19:13,18-di(meteno)dinafto[2,3-*a*:2′,3′-*o*]pentafen (PIN)



1-oksa-5,9,2-(epietano[1,1,2]triylo)cyklookta[*cd*]pentalen (PIN)

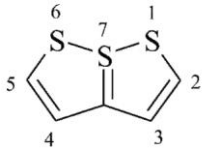
P-25.6 SKONDENSOWANE UKŁADY PIERŚCIENI Z ATOMAMI SZKIELETU O NIESTANDARDOWYCH WIĄZALNOŚCIACH

Konwencję λ stosuje się do opisu atomów o niestandardowej wiązalności (odn. 13) w układzie pierścieni skondensowanych. Stosuje się symbol λ^n, gdzie ‘*n*’ jest wiązalnością atomu; wymienia sie

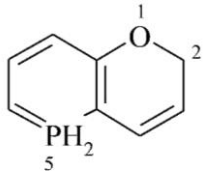
go bezpośrednio za lokantem wskazującym atom o niestandardowej wiązalności. Symbol *H*, oznaczający wskazany atom wodoru, z odpowiednim lokantem, wymienia się przed pełną nazwą.

Symbol λ używa się ze wszystkimi układami pierścieni opisanymi w tym rozdziale, z nazwami zachowanymi i skondensowanymi, nazwami związków bi- i polialicyklicznych a także heterocyklicznych utworzonych przy użyciu nomenklatury zamiennej ‘a’ szkieletu, jak opisano w P-25.5.1. Atomy z niestandardową wiązalnością w układach pierścieni skondensowanych wskazuje się tylko w pełnych układach pierścieni, nie w pierścieniach komponentów. Nazwy i numerowanie pozostają niezmienne, chyba że należy wybrać między dwoma skądinąd równoważnymi atomami; w tym przypadku niższe lokanty przypisuje się atomom o wyższej wiązalności, na przykład λ^6 przed λ^4.

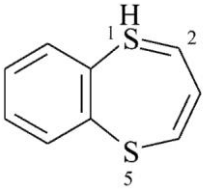
Przykład:



7λ^4-[1,2]ditiolo[1,5-*b*]ditiol (PIN)



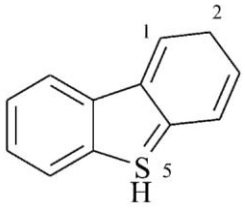
2*H*-5λ^5-fosfinino[3,2-*b*]piran (PIN)



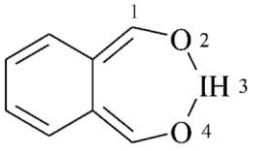
1λ^4,5-benzoditiepin (PIN)

Po przypisaniu maksymalnej liczby nieskumulowanych wiązań podwójnych, każdy atom z pierścienia mający rząd wiązania trzy lub większy, związany z sąsiednimi atomami wiązaniami pojedynczymi i połączony z jednym lub dwoma atomami wodoru, określa się symbolem wskazanego atomu wodoru *H*. Jeżeli jest możliwy wybór, takim atomom przypisuje się niskie lokanty.

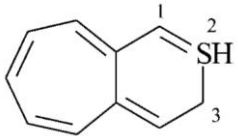
Przykłady:



2*H*-5λ^4-dibenzo[*b*,*d*]tiofen (PIN)



3*H*-3λ^3,2,4-benzojodadioksepin (PIN)



3*H*-2λ^4-cyklohepta[*c*]tiopiran (PIN)

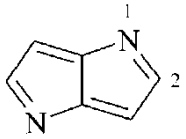
P-25.7 PODWÓJNE WIĄZANIA, WSKAZANY ATOM WODORU I δ-KONWENCJA

W nomenklaturze skondensowanej stosunek do podwójnych wiązań jest sformalizowany. Skondensowany i mostkowy skondensowany układ muszą mieć maksymalną ilość nieskumulowanych wiązań podwójnych. Jeżeli w szczególnych pozycjach występuje nadmiar atomów wodoru, określa sie je w nazwie wskazanymi atomami wodoru. Jednakże może sie także zdarzyć skumulowane wiązanie podwójne. Tą właściwość wyraża konwencja-δ (konwencja delta) (odn. 24). W tym rozdziale opisane są te dwa aspekty układów skondensowanych i mostkowych skondensowanych

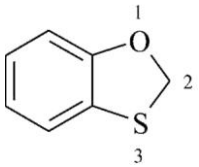
P-25.7.1 Wskazany atom wodoru

P-25.7.1.1 Uważa się, że nazwy policyklicznych skondensowanych układów pierścieni odpowiadają strukturom o maksymalnej liczbie nieskumulowanych wiązań podwójnych, zgodnych z odpowiednią wiązalnością atomów szkieletu. Aby osiągnąć taki wynik, komponenty łączy się i do ukończonego układu skondensowanego wprowadza nieskumulowane wiązania podwójne. Atomy wodoru nie połączone z atomami z wiązaniami podwójnymi nazywa się wskazanymi atomami wodoru.

Przykłady:



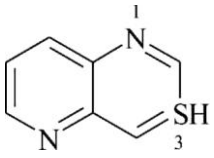
pirolo[3,2-*b*]pirol (PIN)



2*H*-1,3-benzoksatiol (PIN)

Jeżeli występują atomy o niestandardowych wiązalnościach to muszą być wskazane przy użyciu konwencji λ (i w razie potrzeby konwencji δ). Podane wiązalności służą do przypisywania nieskumulowanych wiązań podwójnych.

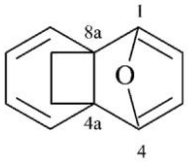
Przykład:



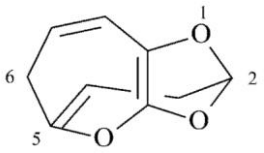
3λ^4-pirydo[3,2-*d*][1,3]tiazyna (PIN)

W mostkowych układach skondensowanych rozkład nieskumulowanych wiązań podwójnych w macierzystym skondensowanym układzie pierścieni uzyskuje się po uwzględnieniu wiązań mostka(ów) i układu pierścieni skondensowanych. Pierścienie będące częścią mostka traktuje się oddzielnie, po rozpatrzeniu wolnych wiązalności mostka.

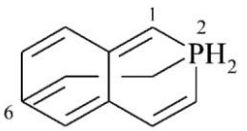
Przykłady:



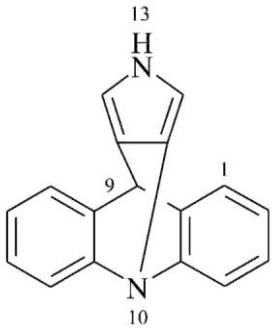
1,4-epoksy-4a,8a-etanonaftalen (PIN)



2*H*,6*H*-2,5-(epietanyloylideno)[1,3]dioksolo[4,5-*b*]oksepin (PIN)



2*H*-2λ^5-2,6-(epietanylideno)izofosfinolina (PIN)

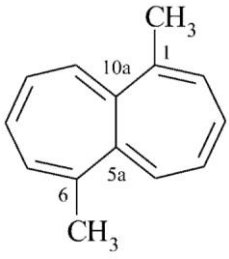


9*H*,13*H*-9,10-[3,4]epipiroloakrydyna (PIN)

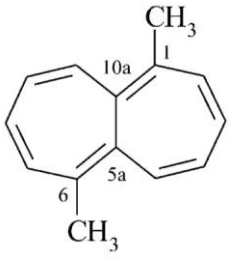
P -25.7.1.2 Zlokalizowane podwójne wiązania

Jeżeli istnieje konieczność zidentyfikowania izomerów różniących się jedynie położeniem zlokalizowanych wiązań podwójnych, czyni się to za pomocą greckiej litery Δ. Lokant podany w górnym indeksie jest pierwszym wymienianym lokantem zlokalizowanego wiązania podwójnego.

Przykłady:



1,6-dimetylo-Δ^1-heptalen (PIN)



1,6-dimetylo-$\Delta^{1(10a)}$-heptalen (PIN)

P-25.7.1.3 Zapisywanie wskazanego atomu wodoru

P-25.7.1.3.1 Jeżeli nazwa odpowiada tak samo dwóm lub większej liczbie izomerycznych systemów z taką samą liczbą nieskumulowanych wiązań podwójnych i jeżeli swoistą nazwę można utworzyć wskazując w strukturze pozycje jednego lub większej liczby atomów wodoru, można to

osiągnąć dodając do nazwy, poprzedzony lokantem, pisany kursywą symbol *H* dla każdego z tych atomów wodoru.

W preferowanych nazwach IUPAC, utworzonych według zasad nomenklatury skondensowanej, należy wymieniać wszystkie wskazane atomy wodoru.

W ogólnej nomenklaturze IUPAC dozwolone jest opuszczanie wskazanych atomów wodoru w niektórych niepodstawionych macierzystych układach pierścieni skondensowanych, na przykład raczej inden zamiast 1*H*-inden, ale kwas 1*H*-indeno-3-karboksylowy. Pomijanie wskazanych atomów wodoru w ogólnej nomenklaturze dozwolone jest w następujących układach pierścieniowych:

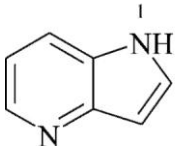
fenalen	1*H*
fluoren	9*H*
indazol	1*H*
inden	1*H*
indol	1*H*
izochromen (i analogi chalkogenowe)	1*H*
izoindol	2*H*
ksanten	9*H*
perimidyna	1*H*
pirol	1*H*
puryna	7*H*

W ogólnej nomenklaturze pomijanie wskazanych atomów wodoru dozwolone jest też wtedy, kiedy nie spowoduje to niejasności, na przykład 1,3-benzodioksol zamiast 2*H*-1,3-benzodioksol.

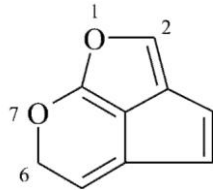
P-25.7.1.3.2 Wskazany atom wodoru w układach *orto*- oraz *orto*- i *para*-skondensowanych

Wskazany atom wodoru jest identyfikowany przez lokant określonej pozycji i wymieniany przed nazwą całego układu pierścieni, włączając człony zamienne, o ile wystepują.

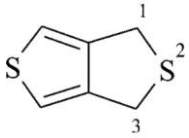
Przykłady:



1*H*-pirolo[3,2-*b*]pirydyna (PIN)



6*H*-1,7-dioksacyklopenta[*cd*]inden (PIN)



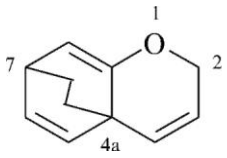
1*H*,3*H*-tieno[3,4-*c*]tiofen (PIN)

P-25.7.1.3.3 Wskazany atom wodoru w mostkowych układach pierścieni skondensowanych

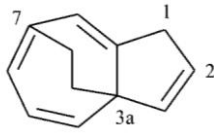
Wszystkie wskazane atomy wodoru wymienia się na początku pełnej nazwy.

> **Uwaga:** Wymienianie wskazanego atomu wodoru w mostkowych układach pierścieni skondensowanych jest w tym względzie dokładnie zgodne z nazywaniem atomów spiro (patrz P-24.3.2) i zespołów pierścieni (patrz P-28.2.3).

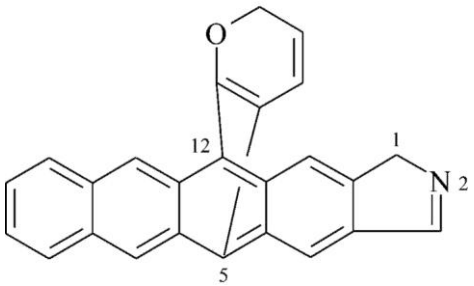
Przykłady:



2*H*,7*H*-4a,7-etano-1-benzopiran (PIN)
2*H*,7*H*-etanochromen



1*H*-3a,7-etanoazulen (PIN)

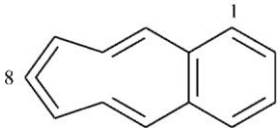


1*H*,15*H*-12,5-[2,3]epipiranoantra[2,3-*f*]izoindol (PIN)

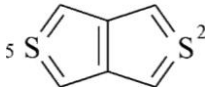
P-25.7.2 Konwencja δ

Obecność skumulowanych wiązań podwójnych atomu szkieletu cyklicznego macierzystego wodorku, którego nazwa normalnie oznacza maksymalna liczbę nieskumulowanych wiązań podwójnych, opisuje się symbolem δ^c, gdzie '*c*' jest liczbą wiązań podwójnych bezpośrednio przyłączonych do rozpatrywanego atomu (patrz odn. 24). Symbol δ^c wymienia się bezpośrednio po lokancie tego atomu w nazwie związku, za symbolem λ^n, o ile występuje.

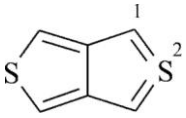
Przykłady:



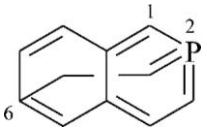
$8\delta^2$-benzo[9]annulen (PIN)



$2\lambda^4\delta^2$, $5\lambda^4\delta^2$-tieno[3,4-*c*]tiofen (PIN)



$2\lambda^4\delta^2$-tieno[3,4-*c*]tiofen (PIN)



$2\lambda^5\delta^2$-6,2-(epietanyloylideno)izofosfinolina (PIN)

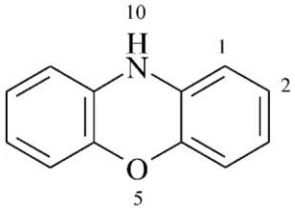
P-25.8 MACIERZYSTE SKŁADNIKIW MALEJĄCYM PORZĄDKU STARSZEŃSTWA
(lista częściowa)

W tym podrozdziale pierścienie i układy pierścieni są ułożone w malejącym porządku starszeństwa do wyboru komponentu macierzystego. Pierwsza lista zawiera heterocykliczne związki macierzyste, druga – węglowodorowe komponenty macierzyste.

P-25.8.1 Częściowa lista heterocyklicznych macierzystych komponentów w malejącym porządku starszeństwa

Poniższa lista zawiera macierzyste związki heterocykliczne ułożone w malejącym porządku starszeństwa przy wyborze macierzystego komponentu do nazw skondensowanych. Układy pierścieni zawierających Hg podane są w odn. 4 i te rekomendacje ich nie zawierają.

Kolejność macierzystych związków heterocyklicznych wynika z analizy pierścieni, to jest malejącego porządku przedstawianych numerycznie pierścieni, wielkości pierścieni i w zgodzie z pierwszeństwem przypisanym heteroatomom, N, O, S, Se.



Uwaga 1: W tym uszeregowaniu nie uwzględnia sie wskazanych atomów wodoru
Uwaga 2: Porządek starszeństwa podany niżej ma służyć wyborowi macierzystego komponentu w nomenklaturze skondensowanej
Uwaga 3: W porządku starszeństwa używanym przed CAS chinolizyna wyprzedza chinolinę i izochinolinę; indolizyna wyprzedza indol i izoindol; a indaceny występują przed bifenylenem.

fenoksazyna	C_4NO-C_6-C_6
fenotiazyna	C_4NS-C_6-C_6
fenoselenazyna	C_4NSe-C_6-C_6
fenotellurazyna	C_4NTe-C_6-C_6
fenazafosfinin	C_4NP-C_6-C_6
fenazarsynin	C_4NAs-C_6-C_6
fenazyna	C_4N_2-C_6-C_6
fenantrolina	C_5N- C_5N-C_6 (malejący porządek starszeństwa w zależności od położenia atomu azotu: 1,7; 1,8; 1,9; 1,10; 2,7; 2,8; 2,9; 3,7; 3,8; 4,7)
perimidyna	C_4N_2-C_6-C_6
akrydyna	C_5N-C_6-C_6
fenantrydyna	C_5N-C_6-C_6

karbazol	C_4N-C_6-C_6
pterydyna	C_4N_2-C_4N_2
cynnolina	C_4N_2-C_6
chinazolina	C_4N_2-C_6
chinoksalina	C_4N_2-C_6
1,5-naftyrydyna	C_5N-C_5N
1,5- naftyrydyna	C_5N-C_5N
1,7- naftyrydyna	C_5N-C_5N
1,8- naftyrydyna	C_5N-C_5N
ftalazyna	C_4N_2-C_6
2,6- naftyrydyna	C_5N-C_5N
2,7- naftyrydyna	C_5N-C_5N
chinolina	C_5N-C_6
izochinolina	C_5N-C_6
puryna	C_3N_2-C_4N_2
indazol	C_3N_2-C_6
indol	C_4N-C_6
izoindol	C_4N-C_6
indolizyna	C_4N-C_5N
pirolizyna	C_4N-C_4N

Siedmioczłonowe lub większe pierścienie heterocykliczne z co najmniej jednym atomem azotu, na przykład azepina

Sześcioczłonowe pierścienie heterocykliczne z co najmniej trzema heteroatomami w tym co najmniej jednym atomem azotu, na przykład 1,3,5-oksadiazyna

Sześcioczłonowe pierścienie heterocykliczne z co najmniej jednym atomem azotu i innym heteroatomem, na przykład 1,2-tiazyna

pirydazyna	C_4N_2
pirymidyna	C_4N_2
pirazyna	C_4N_2
pirydyna	C_5N

Pięcioczłonowe pierścienie heterocykliczne z co najmniej trzema heteroatomami, w tym co najmniej jeden atom azotu , na przykład 1,2,5-oksadiazol (poprzednia nazwa furazan)

Pięcioczłonowe pierścienie heterocykliczne z jednym atomem azotu i innym heteroatomem, na przykład 1,2-oksazol

pirazol	C_3N_2
imidazol	C_3N_2
pirol	C_4N

Cztero- lub trójczłonowe pierścienie heterocykliczne z co najmniej jednym atomem azotu, na przykład azyren

Heterocykliczny pierścień z atomem halogenu, ale nie zawierający atomu azotu, na przykład 1-λ^3-1,2-jodoksol

fenoksatiin	C_4OS-C_6-C_6
fenoksaselenin	C_4OSe-C_6-C_6
fenoksatelluryn	C_4OTe-C_6-C_6
fenoksafosfinin	C_4OP-C_6-C_6
fenoksaarsinin	C_4OAs-C_6-C_6
fenoksastybinin	C_4OSb-C_6-C_6
oksantren	C_4O_2-C_6-C_6
ksanten	C_5O-C_6-C_6
1-benzopiran	C_5O-C_6
2-benzopiran	C_5O-C_6

Siedmioczłonowy lub większy pierścień heterocykliczny z co najmniej jednym atomem tlenu (bez atomów azotu), na przykład oksepin.

Sześcioczłonowy pierścień heterocykliczny z dwoma lub większą liczbą heteroatomów, w tym co najmniej jednym atomem tlenu, na przykład 1,4-dioksyn.

piran	C_5O

Pięcioczłonowy pierścień heterocykliczny z dwoma lub większą liczbą heteroatomów, w tym co najmniej jednym atomem tlenu , (ale bez atomu azotu), na przykład 1,3-dioksol

furan	C_4O

Cztero- lub trójczłonowy pierścień heterocykliczny z co najmniej jednym atomem tlenu (nie zawierający atomu azotu), na przykład oksiren

fenotiarsynin	C_4SAs-C_6-C_6
tiantren	C_4S_2-C_6-C_6
tioksanten	C_5S-C_6-C_6
1-benzotiopiran	C_5S-C_6
2-benzotiopiran	C_5S-C_6

Heteromonocykliczny pierścień z co najmniej jednym atomem siarki (nie ma atomów N ani O), na przykład tiopiran, C_5S

tiofen	C_4S
selantren	C_4Se_2-C_6-C_6
selenoksanten	C_5Se-C_6-C_6
1-benzoselenopiran	C_5Se-C_6
2-benzoselenopiran	C_5Se-C_6

Heteromonocykliczny pierścień z co najmniej jednym atomem selenu (nie ma atomów N, O ani S), na przykład selenopiran, C_5Se

selenofen	C_4Se
tellurantren	C_4Te_2-C_6-C_6
telluroksanten	C_5Te-C_6-C_6
1-benzotelluropiran	C_5Te-C_6
2-benzotelluropiran	C_5Te-C_6

Heteromonocykliczny pierścień z co najmniej jednym atomem telluru (nie ma atomów N, O, S ani Se), na przykład telluropiran, C_5Te

tellurofen	C_4Te
fosfantren	C_4P_2-C_6-C_6
akrydofosfina	C_5P-C_6-C_6
fosfantrydyna	C_5P-C_6-C_6
fosfinolina	C_5P-C_6
izofosfinolina	C_5P-C_6
fosfinolizyna	C_5P-C_5P
fosfindol	C_4P-C_6
izofosfindol	C_4P-C_6
fosfindolizyna	C_4P-C_5P

Heteromonocykliczny pierścień z co najmniej jednym atomem fosforu (nie ma atomów N, O, S, Se ani Te)

arsantren	C_4As_2-C_6-C_6
acrydarsyna	C_5As-C_6-C_6
arsantrydyna	C_5As-C_6-C_6
arsynolina	C_5As-C_6
izoarsynolina	C_5As-C_6
arsynolizyna	C_5As-C_5As
arsindol	C_4As-C_6
izoarsindol	C_4As-C_6
arsindolizyna	C_4As-C_4As

Heteromonocykliczny pierścień z co najmniej jednym atomem arsenu i możliwymi heteroatomami: Sb, Bi, Si, Ge, Sn, Pb, B, Al, Ga, In i Tl

silantren	C_4Si-C_6-C_6
borantren	C_4B-C_6-C_6

P-25.8.2 Częściowa lista węglowodorowych macierzystych komponentów w malejącym porządku starszeństwa

Macierzyste komponenty są uszeregowane:

(1) w malejącym porządku liczby pierścieni

(2) w malejącym porządku wielkości pierścieni

(3) w malejącym porządku starszeństwa orientacji

(4) dla aceantrylenu i acefenantrylenu, we wzrastającym porządku lokantów atomów skondensowania

owalen	$C_6C_6C_6C_6C_6C_6C_6C_6C_6C_6$
oktafenylen	$C_{16}C_6C_6C_6C_6C_6C_6C_6$
tetranaftylen	$C_8C_6C_6C_6C_6C_6C_6C_6$

nonacen	$C_6C_6C_6C_6C_6C_6C_6C_6C_6$
nonafen	$C_6C_6C_6C_6C_6C_6C_6C_6C_6$
nonahelicen	$C_6C_6C_6C_6C_6C_6C_6C_6C_6$
oktacen	$C_6C_6C_6C_6C_6C_6C_6C_6$
oktafen	$C_6C_6C_6C_6C_6C_6C_6C_6$
pirantren	$C_6C_6C_6C_6C_6C_6C_6C_6$
oktahelicen	$C_6C_6C_6C_6C_6C_6C_6C_6$
heksafenylen	$C_{12}C_6C_6C_6C_6C_6$
heptacen	$C_6C_6C_6C_6C_6C_6C_6$
heptafen	$C_6C_6C_6C_6C_6C_6C_6$
trinaftylen	$C_6C_6C_6C_6C_6C_6C_6$
koronen	$C_6C_6C_6C_6C_6C_6C_6$
heptahelicen	$C_6C_6C_6C_6C_6C_6C_6$
rubicen	$C_6C_6C_6C_6C_6C_5C_5$
heksacen	$C_6C_6C_6C_6C_6C_6$
heksafen	$C_6C_6C_6C_6C_6C_6$
heksahelicen	$C_6C_6C_6C_6C_6C_6$
tetrafenylen	$C_8C_6C_6C_6C_6$
pentacen	$C_6C_6C_6C_6C_6$
pentafen	$C_6C_6C_6C_6C_6$
perylen	$C_6C_6C_6C_6C_6$
picen	$C_6C_6C_6C_6C_6$
plejaden	$C_7C_6C_6C_6$
tetracen	$C_6C_6C_6C_6$
tetrafen	$C_6C_6C_6C_6$
chryzen	$C_6C_6C_6C_6$
piren	$C_6C_6C_6C_6$
trifenylen	$C_6C_6C_6C_6$
aceantrylen	$C_6C_6C_6C_5$
acefenantrylen	$C_6C_6C_6C_5$
fluorantren	$C_6C_6C_6C_5$
antracen	$C_6C_6C_6$
fenantren	$C_6C_6C_6$
fenalen	$C_6C_6C_6$
fluoren	$C_6C_6C_5$
acenaftylen	$C_6C_6C_5$
bifenylen	$C_6C_6C_4$
s-indacen	$C_6C_6C_5$
as-indacen	$C_6C_5C_5$
heptalen	C_7C_7
azulen	C_7C_5
naftalen	C_6C_6
inden	C_6C_5
pentalen	C_5C_5

Monocykliczne węglowodory (annuleny i benzen w malejącym porządku wielkości)

P-26 NOMENKLATURA FANÓW

P-26.0 Wprowadzenie
P-26.1 Koncepcje i terminologia
P-26.2 Składniki macierzystych nazw fanów
P-26.3 Lokanty superatomów i lokanty przyłączenia amplifikantów
P-26.4 Numerowanie macierzystych wodorków fanów
P-26.5 Nomenklatura zamienna ‘a’ szkieletu w nomenklaturze fanów
P-26.6 Inne aspekty nomenklatury fanów

P-26.0 WPROWADZENIE

Ten rozdział bazuje na publikacji ‘Phane nomenclature, Part I. Phane parent names’ (odn.5) i nie wprowadza żadnych modyfikacji ani zmian w zawartych w niej zaleceniach.

Nomenklatura fanów jest specyficzna dla cyklicznych lub acyklicznych związków złożonych z pierścieni lub układów pierścieni połączonych ze sobą bezpośrednio lub połączonych atomami bądź łańcuchami.

Cyklofany uważa się za oddzielną klasę związków (odn. 19, 23). Początkowo nazywano tak związki mające dwie grupy 1,4-fenylenowe utrzymywane naprzeciw siebie mostkami $–[CH_2]_n-$ (odn. 23). Teraz cyklofanami nazywa się związki mające:

(a) nasycone i/lub mancude pierścienie lub układy pierścieni, lub zespoły nasyconych i/lub mancude pierścieni lub układów pierścieni oraz;
(b) atomy i/lub nasycone lub nienasycone łańcuchy jako naprzemienne komponenty dużego pierścienia.

Nomenklaturę fanów stosuje się do nazywania cyklofanów i jest też rozszerzona na liniowe związki (do użycia w nomenklaturze fanów do generowania nazw preferowanych przez IUPAC, patrz P-52.2.5).

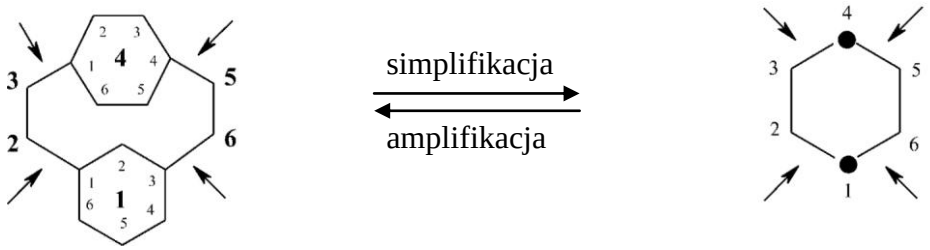
P-26.1 KONCEPCJE I TERMINOLOGIA

Definicje terminów, które będą pojawiać się podczas konstruowania nazw fanów podane są poniżej. Terminy te odnoszą się do rodzajów operacji, do składników nazw fanów i do detali struktur biorących udział w operacjach.

P-26.1.1 Simplifikacja i amplifikacja

Rys. 1 przedstawia podstawowe operacje w nomenklaturze fanów. Operacja zachodząca z lewa na prawo to simplifikacja; operacja przeciwna nazywa się amplifikacją lub zastąpieniem fanów.

Operacja simplifikacji ilustruje początkowy etap w procesie tworzenia nazwy fanu, czyli zastąpienie ważnych nomenklaturowo segmentów skomplikowanej cyklicznej struktury pojedynczym atomem, zwanym superatomem, co prowadzi do uproszczonego szkieletu, który łatwiej nazwać. Nazwę macierzystego wodorku fanu tworzy się z nazwy uproszczonego szkieletu i nazw cyklicznych składników (zwanych amplifikantami), które uproszczono do superatomów. W odróżnieniu od innych wiązań powiązanych z amplifikantami, wiązania oznaczone strzałkami na Rys. 2.1 nie znikają w operacjach simplikacji czy amplifikacji.



macierzysty wodorek fanu
graf A

uproszczony szkielet
graf B

Rys. 2.1 Nomenklatura fanów – diagram konwersji

P-26.1.2 Uproszczony szkielet macierzystego wodorku fanu, uproszczony graf macierzystego fanu, uproszczona nazwa i lokanty szkieletu.

Graf B na rys. 2.1, na którym kończy się simplifikacja i rozpoczyna amplifikacja nazywa się uproszczonym szkieletem macierzystego wodorku fanu, lub po prostu uproszczonym szkieletem reprezentowanym przez uproszczony graf macierzystego fanu. Jego nazwa jest nazwą uproszczonego szkieletu. Nazwa uproszczonego szkieletu oznacza specyficzne numerowanie szkieletu; jego lokanty są lokantami szkieletu, które staną się podstawowymi lokantami macierzystego wodorku fanu. Na Rys. 2.1 lokanty szkieletu pisane są dużymi cyframi; są one takie same w uproszczonym szkielecie i w szkielecie macierzystego fanu.

P-26.1.3 Superatom i lokanty superatomu

'Atomy' uproszczonego szkieletu pokazane symbolem • w pozycjach ‘1’ i ‘4’ w grafie B na rys. 2.1, które pojawiają się po simplifikacji i znikają po amplifikacji nazywane są superatomami. Ich lokanty nazywa się lokantami superatomów.

P-26.1.4 Amplifikant, przedrostek amplifikacji i lokanty amplifikacji

Wieloatomowa jednostka (pierścień lub układ pierścieni) w strukturze, zastępująca superatom w operacji amplifikacji, nazywa się amplifikantem; sześcioczłonowe pierścienie na grafie A są amplifikantami. Wskazuje się je w nazwie macierzystego fanu przedrostkami amplifikacji. Każdy z tych przedrostków wyznacza specyficzne numerowanie amplifikantu; odpowiednie lokanty nazywa się lokantami amplifikantu i pokazane są mniejszymi cyframi w grafie A

P-26.1.5 Atomy przyłączenia i lokanty przyłączenia

Atomy amplifikantu do których przyłączone są wiązania oznaczone strzałkami na Rys. 2.1 nazywa się atomami przyłączenia a ich lokanty są lokantami przyłączenia. Na grafie A na Rys. 2.1 lokanty amplifikantu ‘1’ i ‘4’ są lokantami przyłączenia górnego pierścienia, a lokanty amplifikantu ‘1’ i ‘3’ są lokantami przyłączenia dolnego pierścienia.

P-26.1.6 Szkielet macierzystego fanu, nazwa macierzystego fanu i macierzysty wodorek fanu

Graf szkieletu na początku operacji simplifikacji albo powstający po operacji amplifikacji nazywa się szkieletem macierzystego fanu. Odpowiednio, kombinacja nazwy uproszczonego szkieletu, przedrostki amplifikacji i odpowiednio lokanty superatomów i lokanty przyłączenia, tworzą nazwę macierzystego fanu. Termin ‘macierzysty’ oznacza, że może być łączona z nazwami innych komponentów, pochodnych operacji nomenklatury systematycznej chemii organicznej, takimi

jak przedrostki podstawników, przedrostki i końcówki hydrogenacji, a także przyrostki grup charakterystycznych. Jeżeli nie ma takich komponentów, związek jest macierzystym wodorkiem fanu, co oznacza, że nazwa wskazuje rząd (wiązalność) wszystkich wiązań macierzystego szkieletu a więc i liczbę atomów wodoru połączonych z każdym atomem szkieletu.

P-26.2 SKŁADNIKI NAZW MACIERZYSTYCH FANÓW

P-26.2.1 Nazwy uproszczonego szkieletu
P-26.2.2 Przedrostki amplifikacji
P-26.2.3 Wielokrotność identycznych amplifikantów

P-26.2.1 Nazwy uproszczonego szkieletu

Nazwa uproszczonego szkieletu składa się z terminu ‘fan’ poprzedzonego przedrostkiem określającym strukturę uproszczonego szkieletu; taka nazwa jest podstawą dla amplifikacji, ale nie dla żadnej innej operacji. Operację simplifikacji należy przeprowadzić w taki sposób żeby można było wskazać amplifikanty przedrostkami amplifikacji (patrz P-26.2.2).

Przyjmuje się rząd wiązania równy jedności dla wszystkich wiązań wskazanych w nazwie uproszczonego szkieletu. Atomy nie identyfikowane przez superatomy przedstawiają, umownie, atomy węgla o wiązalności cztery w zgodzie z zasadami nomenklatury związków organicznych.

W nazwie uproszczonego szkieletu superatomom przypisuje się najniższe lokanty lub zestawy najniższych lokantów, zgodnych z numeracja klasy szkieletu, do której należą. Najniższym zestawem lokantów jest ten, który ma niższą wartość numeru w pierwszym punkcie różnicy kiedy zestawy porównywane są znak po znaku w porządku wzrastających wartości (patrz P-14.3.4).

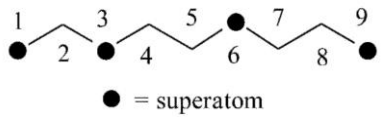
Poniżej przedstawione są cztery typy struktur uproszczonych szkieletów, nierozgałęziony acykliczny (P-26.2.1.1), monocykliczny (P-26.2.1.2), policykliczny von Baeyera (P-26.2.1.3) i spiro (P-26.2.1.4).

Nazwy struktur uproszczonych szkieletów składają się, kolejno, z przedrostka (‘cyklo’, ‘bicyklo’, ‘spiro’ etc.) wskazującego rodzaj struktury, członu liczbowego ‘di’, ‘tri’, 'tetra' etc. wskazującego liczbę węzłów (łącznie z tymi wskazującymi superatomy), i terminu ‘fan’. W nazwach liniowych fanów nie używa się przedrostka.

Węzły numeruje się zgodnie z zaleceniami numerowania dla każdego rodzaju struktury, jak wskazywano w Rozdziale 2. Superatomy otrzymują najniższe możliwe lokanty.

P-26.2.1.1 Struktury nierozgałęzionych uproszczonych szkieletów

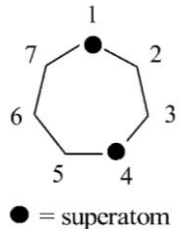
Przykład:



nonafan (patrz P-26.4.1.2 i pierwszy przykład z P-26.5.1)

P-26.2.1.2 Struktury monocyklicznych uproszczonych szkieletów

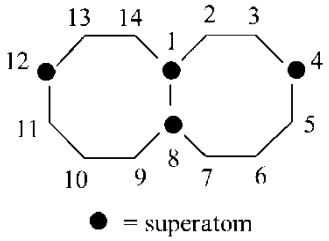
Przykład:



cykloheptafan
(patrz pierwszy przykład z P-26.4.1.4;
drugi przykład z P-26.4.2.2;
i pierwszy przykład z P-26.4.3.3)

P-26.2.1.3 Policykliczne (von Baeyera) uproszczone struktury szkieletów

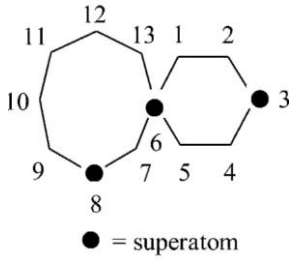
Przykład:



bicyklo[6.6.0]tetradekafan
(patrz trzeci przykład z P-26.4.2.2)

P-26.2.1.4 Uproszczone spiro struktury szkieletów

Przykład:



spiro[5.7]tridekafan
(patrz drugi przykład z P-26.4.2.4)

P-26.2.2 Przedrostki amplifikacji

P-26.2.2.1 Nazywanie przedrostków amplifikacji

Nazwami przedrostków amplifikacji są dozwolone nazwy pierścieni lub układów pierścieni (patrz P-26.2.2.2.1) modyfikowane dodaniem na końcu litery ‘a’.

Przykład:	pirol (PIN)	pirola (preferowany przedrostek)
	furan (PIN)	furana (preferowany przedrostek)
	piran (PIN)	pirana (preferowany przedrostek)
	naftalen (PIN)	naftalena (preferowany przedrostek)
	antracen (PIN)	antracena (preferowany przedrostek)

P-26.2.2.2 Nazwy macierzystych wodorków do tworzenia przedrostków amplifikacji

P-26.2.2.2.1 Dozwolone nazwy macierzystych wodorków

Przedrostki amplifikacji można tworzyć z nazw monocyklicznych pierścieni i policyklicznych układów pierścieni mających maksymalną ilość nieskumulowanych wiązań podwójnych (mancude), mostkowych skondensowanych układów pierścieni, nasyconych monocyklicznych pierścieni, nasyconych bicykloalkanów i policykloalkanów (węglowodory von Baeyera) i spiro alkanów. Ponadto dozwolone są nazwy związków o macierzystej stereochemii, takie jak ‘gonan’ lub ‘morfinan’ (patrz Rozdział P-10). Zachowane jest numerowanie macierzystego związku.

P-26.2.2.2.2 Niedozwolone nazwy macierzystych wodorków

(a) niedozwolone są następujące nazwy macierzystych wodorków:

(1) nazwy spirobi takie jak '1,1′-spirobi[inden] (PIN)

(2) nazwy układów pierścieni spiro z co najmniej jednym skondensowanym układem pierścieni lub układy pierścieni policykloalkanowych, takich jak ‘spiro[1,3-dioksolano-2,1′-inden]’ (PIN) i ‘spiro[bicyklo[2.2.2]oktano-2,1′-cykloheksan]’ (PIN)

(3) nazwy zespołów pierścieni, takie jak ‘1,1′-bifenyl’ (PIN)

(b) nazwy modyfikowanych macierzystych wodorków (odpowiednie modyfikacje robi się po zakończeniu konstruowania macierzystego wodorku fanu):

(1) przedrostkami ‘hydro’, takie jak ‘9,10-dihydroantracen’

(2) końcówkami ‘-en’ i ‘yn’, takie jak ‘cykloheksen’(PIN)

(3) członami zamiennymi ‘a’ szkieletu, takie jak ‘1-azabicyklo[3.2.1]oktan’ (PIN)

(4) przyrostkami, takie jak ‘kwas cykloheksanokarboksylowy’ (PIN) i ‘cykloheksanon’ (PIN)

(5) przedrostkami podstawnikowymi, takie jak ‘etylobenzen’ (PIN)

(c) związki o macierzystych funkcjach o zachowanych nazwach zwyczajowych, takie jak ‘kwas benzoesowy’ i ‘anilina’;

(d) nazwy cyklicznych związków utworzone nomenklaturą klasowo-funkcyjną, takie jak ‘chlorek benzylu’

(e) częściowo uwodornione macierzyste wodorki o zachowanych nazwach, takie jak ‘indan’ i ‘chroman’

P-26.2.2.3 Kolejność wymieniania przedrostków amplifikacji

Przedrostki amplifikacji wymienia się w nazwie w malejącym porządku starszeństwa ich pierścieni (patrz P-44.2).

P-26.2.3 Wielokrotne identyczne amplifikanty

Amplifikanty występujące więcej niż raz w macierzystym szkielecie fanu wyraża się za pomocą przedrostków zwielokrotniających, albo ‘di’, ‘tri’ etc. albo ‘bis’, 'tris', etc. Nie jest konieczne, aby przedrostki identycznych amplifikantów miały też identyczne lokanty.

P-26.2.3.1 Przedrostki zwielokrotniające ‘di’, ‘tri’, 'tetra' etc. umieszcza się przed prostymi przedrostkami ampkifikacji, na przykład dibenzena, tripirydyna.

P-26.2.3.2 Przedrostki zwielokrotniające ‘bis’, 'tris', 'tetrakis' etc. umieszcza się przed przedrostkiem amplifikacji, jeżeli rozpoczyna się on przedrostkiem zwielokrotniającym jak w ‘bicyklo[2,2,1]heptan’ (PIN), ‘1,3-dioksol’ (PIN); albo rozpoczyna się nazwą komponenta, którą można poprzedzić przedrostkiem zwielokrotniającym wskazującym wielokrotność występowania tej nazwy kompotentu, jak w ‘2,4-oksazyna’ (PIN), ‘2-benzooksepina’ (PIN) i ‘1,4-metanonaftalen’ (PIN).

P-26.3 LOKANTY SUPERATOMÓW I LOKANTY PRZYŁĄCZENIA AMPLIFIKANTÓW

Po określeniu nazw uproszczonego szkieletu i przedrostka amplifikacji nazwę macierzystego wodorku fanu kompletuje się dodając lokanty superatomów i lokanty przyłączenia. Te lokanty wymienia się przed przedrostkiem amplifikacji; jako pierwsze wymienia się lokanty superatomów, za nimi, w nawiasie, lokanty przyłączenia.

P-26.3.1 Lokanty superatomów

Lokantom superatomów przypisuje się najniższe lokanty w uproszczonym szkielecie, zgodne z numerowaniem klasy do której należy. Przedrostek amplifikacji poprzedzony członem zwielokrotniającym wskazującym obecność identycznych amplifikantów wymaga odpowiedniej liczby lokantów superatomów, które wymienia się we wzrastającym porządku liczbowym.

Kiedy identyczne amplifikanty mają także identyczne lokanty przyłączenia, ich lokanty przyłączenia ustawia się we wzrastającym porządku liczbowym pierwszego cytowanego lokantu superatomu.

P-26.3.2 Lokanty przyłączenia

Lokanty w nawiasie w nazwie macierzystego wodorku fanu są lokantami przyłączenia amplifikantu, którego pozycję w szkielecie fanu podaje poprzedzający lokant superatomu. Specyficzny porządek lokantów przyłączenia w zestawie określa precyzyjnie sposób w jaki określony amplifikant jest przyłączony do reszty macierzystego szkieletu fanu. Amplifikanty zachowują numerację cyklicznego macierzystego wodorku od którego pochodzą.

P-26.3.2.1 Identyczne zestawy lokantów przyłączenia dla wielu identycznych amplifikantów wymienia się tylko raz w nazwie; po zestawie lokantów superatomów odpowiadających identycznym amplifikantom.

Przykład: 1,4(1,4)-dibenzenacykloheptafan (PIN)
[nie 1(1,4),4(1,4)- dibenzenacykloheptafan;
patrz drugi przykład z P-26.4.2.2]

P-26.4 NUMEROWANIE MACIERZYSTYCH WODORKÓW FANÓW

Poniższe reguły stosuje się do numerowania macierzystych wodorków fanów. Te reguły są hierarchiczne; czyli każda z reguł stosuje się tylko do alternatyw nie wyeliminowanych przez poprzednie reguły.

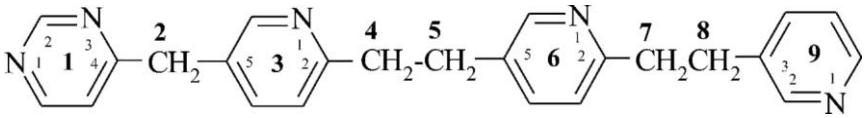
P-26.4.1 Numerowanie macierzystego szkieletu fanu i amplifikantów

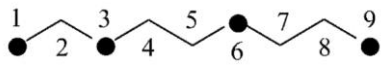
P-26.4.1.1 Numerowanie macierzystego szkieletu fanu jest najpierw określone przez klasę, do której należy. Kiedy z powodu symetrii te reguły pozostawiają alternatywy, wybiera się numerowanie dające najniższe lokanty superatomom. Najniższy zestaw lokantów to taki, który ma najniższą wielkość w pierwszym punkcie różnicy kiedy zestawy porównywane są znak po znaku we wzrastającym porządku, jak zdefiniowano w P-14.3.5.

P-26.4.1.2 Numerowanie amplifikantu jest określone najpierw przez reguły numerowania odnoszące się do nazwy macierzystej, z której wywodzi się przedrostek amplifikacji. Jeżeli istnieje wybór, stosuje się ogólne reguły najniższych lokantów, jak opisano w poprzedniej regule.

Poniższe reguły ilustrują dwie reguły, P-26.4.1.1 i P-26.4.1.2.

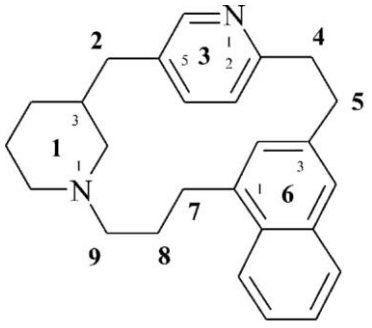
Przykłady:

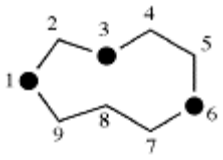




uproszczony szkielet
● = superatom

1(4)-pirymidyna-3,6(5,2),9(3)-tripirydynanonafan (PIN)
[nie 9(4)-pirymidyna-1(3),4,7(2,5)- tripirydynanonafan;
zestaw lokantów superatomu PIN, ‘1,3,6,9’ jest niższy od ‘1,4,7,9’, patrz P-26.2.1.1 i P-26.4.1.1]
[nie 1(4)-pirymidyna-3,6(2,5),9(3)-tripiridynanonafan;
pierwszy lokant zestawu lokantów przyłączenia pirydyny, ‘2,5’ nie jest bliski mniejszemu lokantowi uproszczonego szkieletu, patrz P-26.3.2.2]
[nie 1(4)-pirymidyna-3(5,2), 6(5,2)-9(3)-tripirydynanonafan;
identyczne zestawy lokantów przyłączenia ‘(5,2)’ nie zostały połączone jako ‘3,6(5,2)’, patrz P-26.3.2.1]
[nie 1(4)-pirymidyna-3,6(3,6),9(3)-tripirydynanonafan;
zestaw lokantów przyłączenia ‘(5,2)’ amplifikantu przyłączenia pirydyny w PIN, napisany we wzrastającym porządku, jest niższy od zestawu ‘(6,3)’, patrz P-26.4.1.2]





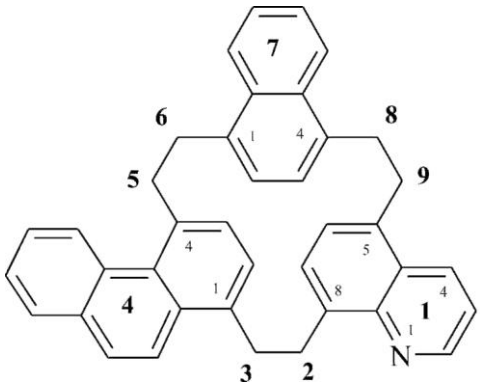
uproszczony szkielet
● = superatom

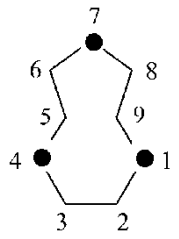
3(5,2)-pirydyna-1(3,1)-piperydyna-6(3,1)naftalenacyklononanfan (PIN)

[nie 1(5,2)-pirydyna-3(3,1)-piperydyna-7(3,1)naftalenacyklononafan
ani 7(5,2)-pirydyna-5(3,1)-piperydyna-1(3,1)-naftalenacyklononafan;
zestaw lokantów superatomu w PIN, ‘1,3,6’, jest niższy od zestawu
‘1,3,7’ lub ‘1,5,7’ w każdej z innych nazw, patrz P-26.4.1.1]
[nie 3(2,5)-pirydyna-1(1,3)-piperydyna-6(1,3)-naftalenacyklononafan;
pierwszy lokant z każdego z zestawów lokantów ‘(2,5)’, ‘(1,3)’ i ‘(1,3)’ dla
pirydyny,piperydyny i naftalenu nie jest lokantem sąsiadującym z
niższym lokantem uproszczonego macierzystego szkieletu, patrz P-26.3.2.2]

P-26.4.1.3 Amplifikacja symetrycznego uproszczonego szkieletu fanu z co najmniej dwoma superatomami reprezentującymi różne amplifikanty skutkuje utratą symetrii i stwarza liczne alternatywy. W takich przypadkach najniższy dostępny lokant dla superatomu przypisuje się amplifikantowi występującemu wcześniej w układzie starszeństwa pierścieni i układów pierścieni (patrz P-44.2). Stosowanie tej procedury może wymagać sekwencji kroków. Najpierw najniższy dostępny lokant(y) przypisuje się amplifikantom pojawiającym się wcześniej w porządku starszeństwa. Następnie tą samą procedurę stosuje się kolejno do przypisywania pozostałych lokantów superatomów reszcie amplifikantów.

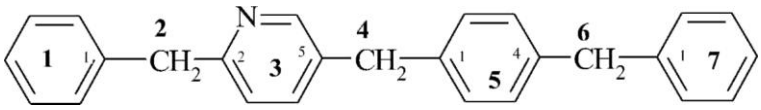
Przykład:

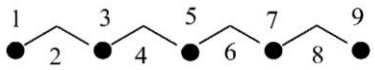




uproszczony szkielet
● = superatom

1(8,5)-chinolina-4(1,4)-fenantrena-7(1,4)-naftalenacyklononafan (PIN)
[nie 1(8,5)-chinolina-4(1,4)-naftalena-7(4,1)-fenantrenacyklononafan;
starszym amplifikantem jest chinolina (patrz P-44.2) i musi otrzymać
najniższy lokant dla superatomu ‘1’; amplifikant fenantren jest drugi
w starszeństwie (patrz P-44.2) i dlatego musi otrzymać drugi najniższy
lokant ‘4’ dla superatomu, patrz P-26.2.2.3]
[nie 1(8,5)-chinolina-4(4,1)-fenantrena-7(1,4)-naftalenacyklononafan;
lokanty przyłączenia amplifikantu fenantrenu ‘(4,1)’ nie są wymienione
prawidłowo; pierwszy lokant zestawu lokantów przyłączenia nie sąsiaduje
z niższym lokantem uproszczonego macierzystego szkieletu, ‘3’ (patrz
P-26.3.2.2)



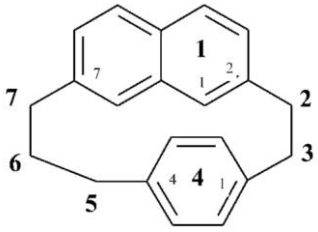


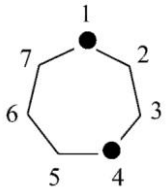
uproszczony szkielet
● = superatom

3(2,5)-pirydyna-1,7(1),5(1,4)-tribenzenanonafan (PIN)
[nie 5(5,2)-pirydyna-1,7(1),3(1,4)-tribenzenaheptafan;
lokant ‘3’dla amplifikanta pirydyny w PIN jest niższy
niż ‘5’, patrz P-26.3.1]

P-26.4.1.4 Jeżeli z powodu symetrii te reguły pozostawiają wybór, to amplifikant numeruje się w taki sposób, że niższy lokant przyłączenia sąsiaduje z niższym lokantem macierzystego szkieletu fanu.

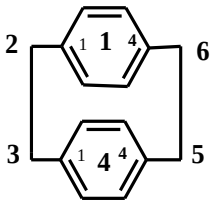
Przykłady:

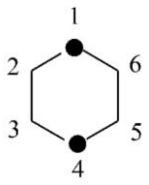




uproszczony szkielet
● = superatom

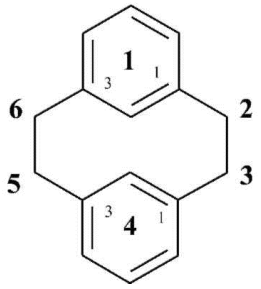
1(2,7)-naftalena-4(1,4)-benzenacykloheptafan (PIN)
[najniższy zestaw lokantów superatomów w macierzystym szkielecie PIN to '1,4'; wobec tego starszy amplifikant, naftalen' (patrz P-44.2) musi otrzymać dla superatomu lokant ‘1’, patrz P-26.4.1.2 i P—26.4.1.1]
[nie 1(2,7)-naftalena-4(4,1)-benzenacykloheptafan ani 1(7,2)-naftalena-4(4,1)-benzenacykloheptafan; prawidłowa kolejność wymieniania zestawów lokantów dołączenia amplifikantów, ‘(1,4)’ dla benzenu i ‘(2,7)’ dla naftalenu w PIN umieszcza niższy lokant przyłączenia w sąsiedztwie niższego lokantu uproszczonego macierzystego szkieletu (patrz 26.3.2.2)]

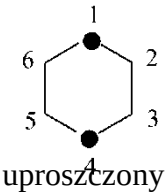




1,4(1,4)-dibenzenacykloheksafan (PIN)

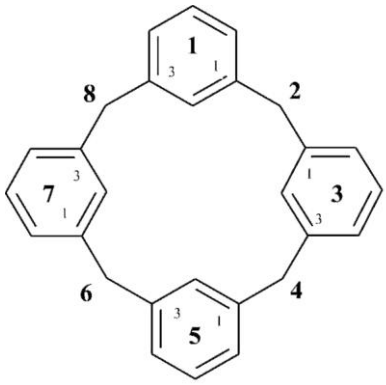
uproszczony szkielet
● = superatom

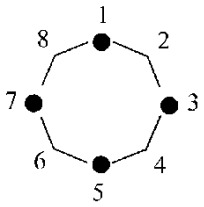




uproszczony szkielet
• = superatom

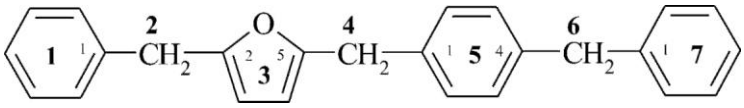
1,4(1,3)-dibenzenacykloheksafan (PIN)

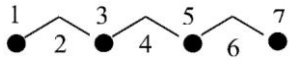




uproszczony szkielet
• = superatom

1,3,5,7(1,3)-tetrabenzacyklooktafan (PIN)





uproszczony szkielet
• = superatom

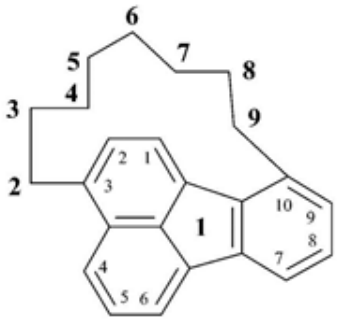
3(2,5)-furana-1,7(1),5(1,4)-tribenzenaheptafan (PIN)
[nie 3(5,2)-furana-1,7(1),5(1,4)-tribenzenaheptafan; dla superatomu **3** zestaw lokantów przyłączenia ‘2,5’ w PIN jest niższy od ‘5,2’]

P-26.4.2 Numerowanie uproszczonego szkieletu fanu w odniesieniu do numerowania amplifikantu

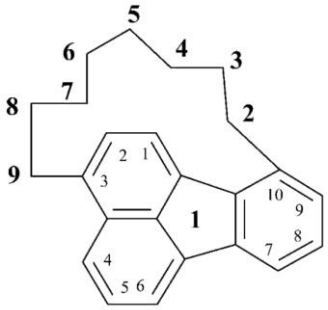
Alternatywne numerowanie pojawia się w symetrycznych uproszczonych szkieletach, kiedy amplifikacja pojedynczego niesymetrycznego amplifikantu lub identycznych amplifikantów mających różne lokanty przyłączenia likwiduje symetrię. Poniższe reguły podają jak wybrać między tymi alternatywami.

P-26.4.2.1 Jeżeli pojedynczy amplifikant jest niesymetryczny, niski lokant macierzystego szkieletu fanu musi sąsiadować z niskim lokantem przyłączenia amplifikantu.

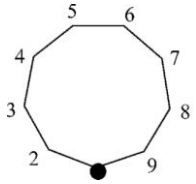
Przykład:



(I)



(II)

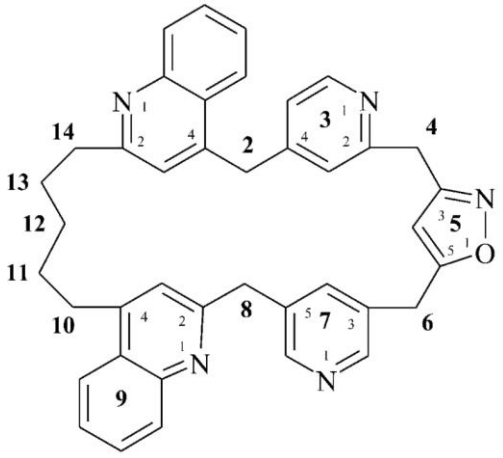


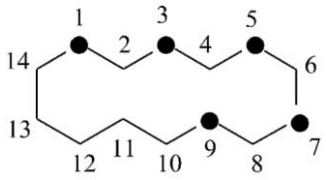
uproszczony szkielet
● = superatom

1(3,10)-fluorantenacyklononafan (**I**) (PIN)
[nie 1(10, 3)-fluorantenacyklononafan (**II**); niższy lokant 3′ amplifikantu musi sąsiadować z niższym lokantem 2′ uproszczonego szkieletu fanu]

P-26.4.2.2 Kiedy dwóm amplifikantom można przydzielić niższy z dwóch lokantów superatomów, niższy lokant przypisuje sie superatomowi reprezentującemu amplifikant z niższym zestawem lokantów przyłączenia. Jeżeli zajdzie taka potrzeba, procedurę tę stosuje się do innych amplifikantów, z uwzględnieniem ich porządku starszeństwa, aż dwa lub więcej amplifikantów będzie miało różne lokanty przyłączenia (patrz ostatni przykład)

Przykłady:

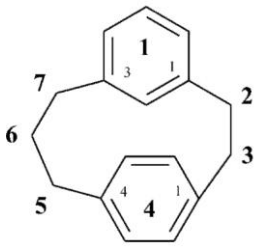


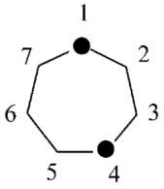


uproszczony szkielet
● = superatom

1(4,2),9(2,4)-dichinolina-3(4,2),7(3,5)-dipirydyna-5(3,5)-[1,2]oksazolacyklotetradekafan (PIN)
{nie 1,9(2,4)-dichinolina3(5,3),7(2,4)-dipirydyna-5(3,5)-[1,2]oksazolacyklotetradekafan; zestaw lokantów przyłączenia dla starszego amplifikanta chinoliny, zestawy lokantów ‘4,2’ i ‘2,4’, odpowiednio, porównywane znak po znaku – są identyczne, ale w porównaniu zestawów lokantów przyłączenia dla amplifikantu pirydyny, ‘(4,2)’ i ‘(5,3)’ porównuje się z

‘(2,4)’ i ‘(3,5)’ ten pierwszy jest niższy i dlatego w PIN zestaw lokantów przyłączenia ‘(4,2)’ jest związany z superatomem o niższym lokancie ‘3’(patrz P-26.2.2.3)}



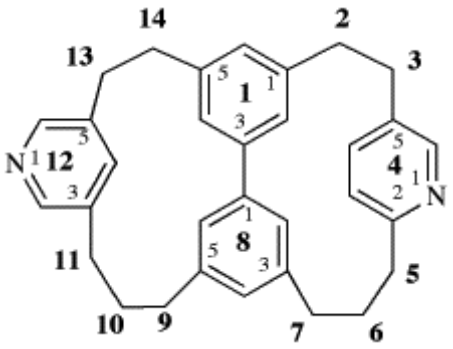


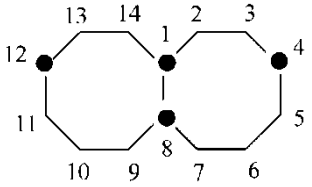
uproszczony szkielet
● = superatom

1(1,3),4(1,4)-dibenzenacykloheptafan (PIN)

[nie 1(1,4),4(1,3)-dibenzenacykloheptafan; niższy zestaw lokantów przyłączenia '(1,3)' nie jest związany z heteroatomem o niższym lokancie]

[nie 1(1,3),4(4,1)-dibenzenacykloheptafan; w zestawie lokantów przyłączenia (4,1) pierwszy lokant nie sąsiaduje z niższym lokantem uproszczonego macierzystego szkieletu, patrz P-26.3.2.2]

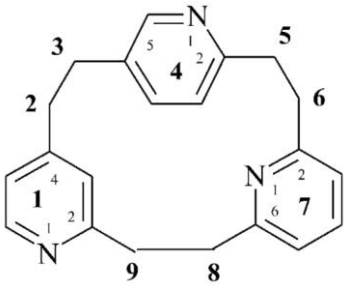


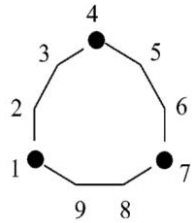


uproszczony szkielet
● = superatom

4(5,2),12(3,5)-dipirydyna-1,8(1,3,5)-dibenzenabicyklo[6.6.0]tetradekafan (PIN)

[nie 4(3,5),12(2,5)-dipirydyna-1,8(1,3,5)-dibenzenabicyklo[6.6.0]tetradekafan; ponieważ zestaw lokantów przyłączenia dla pirydyny ‘(5,2)’, porównywany w rosnącym porządku czyli ‘(2,5)’ jest niższy od ‘(3,5)’, stąd w nazwie PIN amplifikant pirydyny z zestawem lokantów ‘(5,2)’ musi sąsiadować z niższym lokantem superatomu, ‘4’]

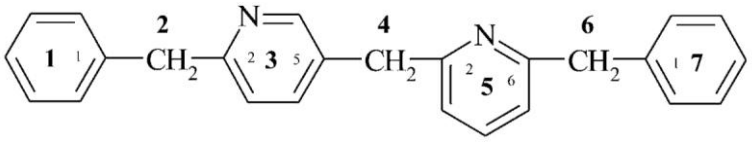


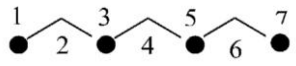


uproszczony szkielet
● = superatom

1(4,2),4(5,2),7(2,6)-tripirydynacyklononafan (PIN)

[zestawy lokantów przyłączenia ‘(2,4)’, ‘(2,5)’ i ‘(2,6)’ muszą być przypisane do superatomów, odpowiednio, ‘1’, ‘4’ i ‘7’; układ lokantów w każdym zestawie musi być zgodny z P-26.4.1.3]



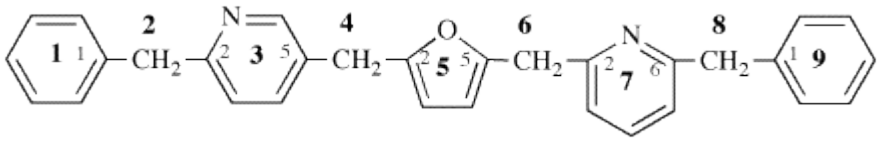


uproszczony szkielet
● = superatom

3(2,5),5(2,6)-dipirydyna-1,7(1)-dibenzenaheptafan (PIN)
[nie 3(6,2),5(5,2)-dipirydyna-1,7(1)-dibenzenaheptafan; lokanty przyłączenia ‘2,5’ i ‘2,6’ amplifikantów pirydyny muszą być przydzielone, odpowiednio, superatomom ‘3’i ‘5’(patrz P-26.4.1.3)

P-26.4.2.3 Jeżeli po zastosowaniu P-26.4.2.2 wciąż konieczny jest wybór a pozostaje pojedynczy niesymetryczny amplifikant, to P-26.4.2.2 stosuje się do niego.

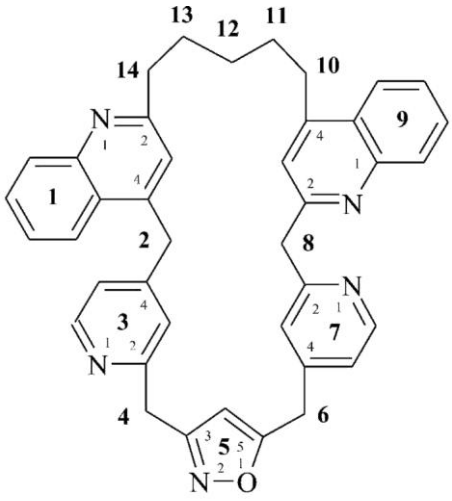
Przykład:



uproszczony szkielet

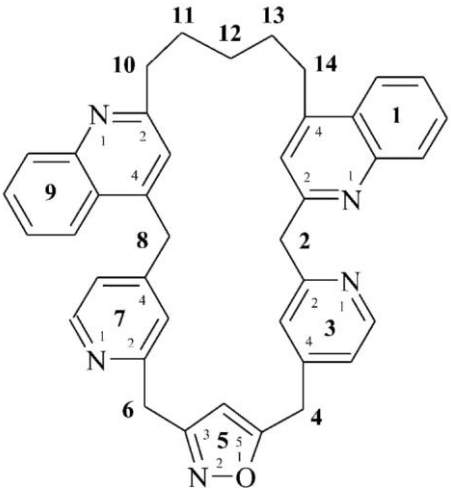
● = superatom

3(2,5),7(2,6)-dipirydyna-5(2,5)-furana-1,9(1)-dibenzenanonafan(PIN)
[nie 3(2,5),7(2,6)-dipirydyna-5(5,2)-furana-1,9(1)-dibenzenanonafan; pierwszy lokant z zestawu lokantów przyłączenia ‘5,2’ nie sąsiaduje z najniższym lokantem uproszczonego macierzystego szkieletu, ‘1’ (patrz P-26.3.2.2)]

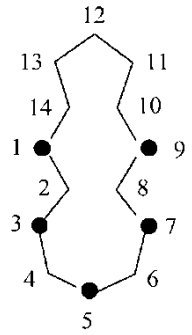


I

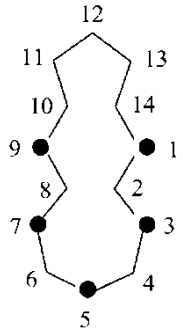
nie



II



uproszczony szkielet
• = superatom

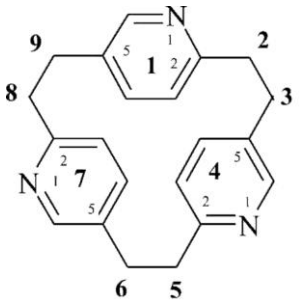


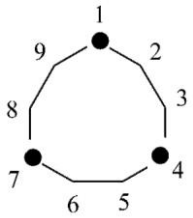
uproszczony szkielet
• = superatom

1(4,2),9(2,4)-dichinolina-3,7(4,2)-dipirydyna-5(3,5)-[1,2]oksazolatetradekafan (**I**) (PIN)
[nie 1(2,4),9(4,2)-dichinolina-3,7(2,4)-dipirydyna-5(5,3)-[1,2]oksazolatetradekafan (**II**); każdy z par identycznych amplifikantów, chinolina i pirydyna, mają identyczne lokanty przyłączenia, odpowiednio ‘2,4’ i ‘2,4’; pojedynczym niesymetrycznym amplifikantem jest 1,2-oksazol i do niego odnosi się P-26.4.2.1; niższy lokant 1,2-oksazolu ‘3’ musi sąsiadować z niższym lokantem uproszczonego macierzystego szkieletu, ‘4’]

P-26.4.2.4 Jeżeli dla uproszczonego szkieletu fanu możliwe są wciąż dwa sposoby numerowania, wybiera się ten, który daje niższy zestaw lokantów w taki sposób, aby lokanty przyłączenia wszystkich amplifikantów, tak jak pojawiają się w nazwie, porównywały się w rosnącym porządku z odpowiadającymi im lokantami superatomów.

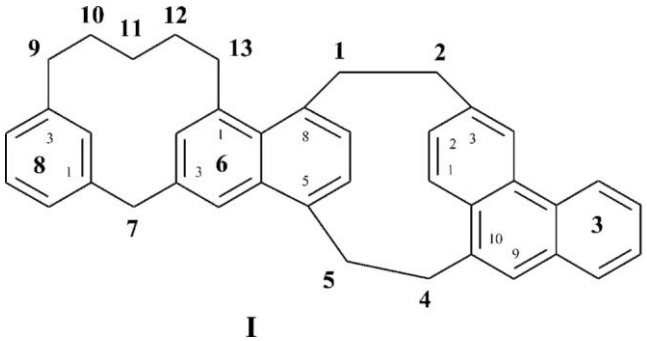
Przykłady:



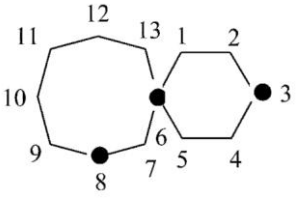


uproszczony szkielet
• = superatom

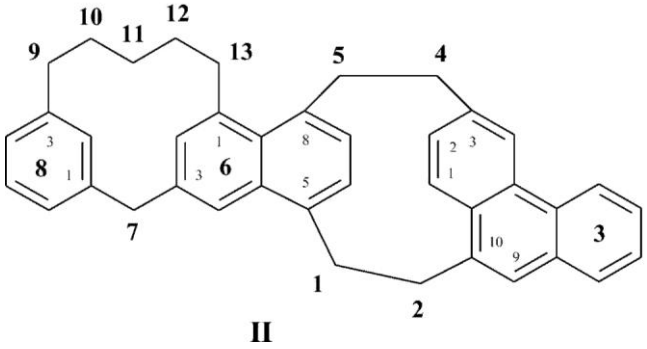
1(2,5),4,7(5,2)-tripirydynacyklononafan (PIN)
[nie 1(5,2),4,7(2,5) tripirydynacyklononafan; przy porównaniu w rosnącym porządku wielkości odpowiadających superatomów , zestaw lokantów amplifikantów ‘(2,5)95,2)(5,2)’ w PIN jest niższy niż ‘(5,2)(2,5)(2,5)’]



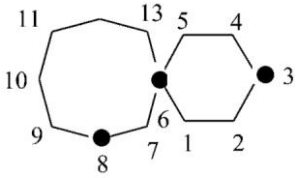
I



uproszczony szkielet

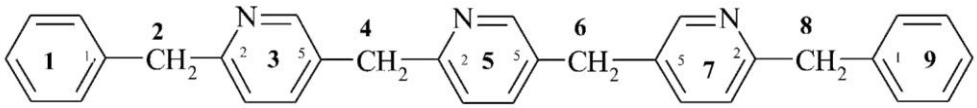


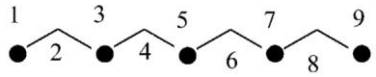
II



uproszczony szkielet
● = superatom

3(3,10)-fenantrena-6(8,5,3,1)-naftalena-8-(1,3)-benzenaspiro[5,7]tridekafan (**I**) (PIN)
[nie 3(10,3)-fenantrena-6(8,5,3,1)-naftalena-8-(1,3)-benzenaspiro[5,7]tridekafan (**II**);
zestaw lokantów przyłączenia '(3,10)(8,5,3,1)(1,3)' dla PIN porównywany w rosnącym porządku wielkości odpowiadających im lokantów superatomów jest niższy niż zestaw lokantów przyłączenia w **II**, '(10,3)(8,5,3,1)(1,3)']





uproszczony szkielet
● = superatom

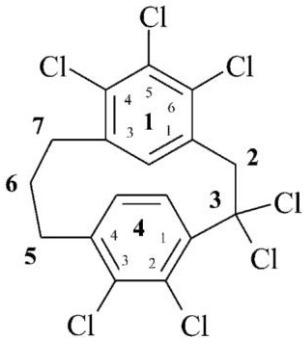
P-26.4.3 Numerowanie macierzystych wodorków fanów

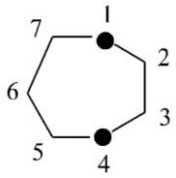
P-26.4.3.1 W macierzystym wodorku fanu lokanty atomów nie należących do amplifikantów są lokantami uproszczonego szkieletu. Lokanty atomów amplifikanta należy jednak odróżnić od pisanych arabskimi liczbami lokantów uproszczonego szkieletu. Zatem lokanty atomów amplifikanta składaja się z właściwego lokantu amplifikanta pisanego jako górny indeks lokantu superatomu reprezentującego ten amplifikant w uproszczonym szkielecie.

P-26.4.3.2 W nazwie macierzystego wodorku podstawionego fanu nie należy skracać serii złożonych lokantów bazujących na lokantach superatomów. Jako reguła wymieniania lokantów przed rozłącznymi przedrostkami, musi być kilka lokantów odpowiadających przedrostkom zwielokrotniającym 'di', 'tri' etc. przed przedrostkiem.

P-24.3.3 Starszeństwo złożonego lokantu określa się najpierw na podstawie jego głównych lokantów, to jest lokantów szkieletu macierzystego fanu a jeżeli te lokanty są takie same to na podstawie całego złożonego lokantu, to znaczy głównego lokantu z indeksami górnymi.

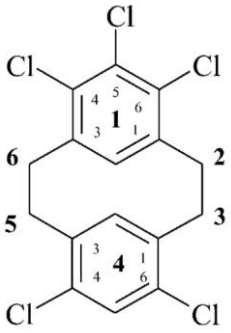
Przykłady:

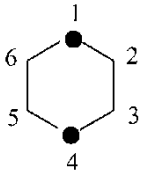




uproszczony szkielet
● = superatom

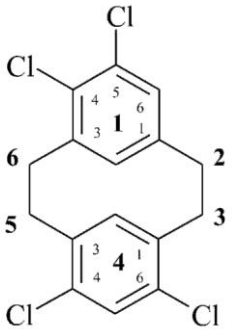
$1^4,1^5,1^6,3,3,4^2,4^3$-heptachloro-1(1,3),4(1,4)-dibenzenacykloheptafan (PIN)
[nie $1^{4,5,6},3,3,4^{2,3}$-heptachloro-1(1,3),4(1,4)-dibenzenacykloheptafan, nie skraca się lokantów w górnych indeksach określających pozycje w amplifikantach (patrz P-26.4.3.2]
[nie $1^2,1^3,2,2,4^4,4^5,4^6$-heptachloro-1(1,4),4(1,3)-dibenzenacykloheptafan; amplifikant z niższym zestawem lokantów przyłączenia nie jest przypisany do superatomu z niższym zestawem lokantów (patrz P-26.4.3.3)]

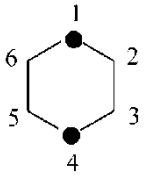




uproszczony szkielet
● = superatom

$1^4,1^5,1^6,4^4,4^6$-pentachloro-1,4(1,3)-dibenzenacykloheksafan (PIN)
[nie $1^4,1^6$, $4^4,4^5,4^6$-pentachloro-1,4(1,3)-dibenzenacykloheksafan; główny zestaw lokantów ‘1,1,1,4,4’ jest niższy od zestawu ‘1,1,4,4,4’ (patrz P-26.4.3.3)]



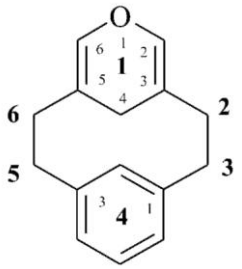


uproszczony szkielet
● = superatom

$1^4,1^5,4^4,4^6$-tetrachloro-1,4(1,3)-dibenzenacykloheksafan (PIN)
[nie $1^4,1^6,4^5,4^6$-tetrachloro-1,4(1,3)-dibenzenacykloheksafan; główne zestawy lokantów ‘1,1,4,4’ są identyczne ale złożony zestaw lokantów w PIN, ‘$1^4,1^5,4^4,4^6$’ jest niższy od ‘$1^4,1^6,4^5,4^6$’(patrz P-26.4.3.3)

P-26.4.3.4 Jeżeli w amplifikantach występuje wskazany atom wodoru wymienia się go, wraz ze złożonym lokantem (lokantami), przed nazwą macierzystego wodorku fanu.

Przykład:



1^{4}*H*-1(3,5)pirana-4(1,3)benzenacykloheksafan (PIN)

P-26.5 NOMENKLATURA ZAMIENNA ‘a’ SZKIELETU W NOMENKLATURZE FANÓW

Nomenklaturę zamienną ‘a’ szkieletu w nomenklaturze fanów stosuje się dwojako:

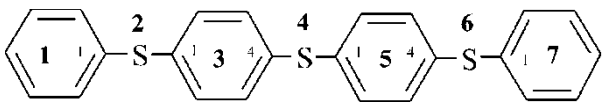
(1) do nazywania macierzystych wodorków fanów mających heteroatomy w uproszczonym szkielecie fanu; to znaczy że heteroatomy nie występują w nazwach przedrostków amplifikacji;

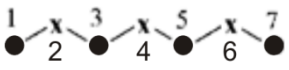
(2) do wskazania heteroatomów w heterocyklicznych amplifikantach, których nazwy nie mogą być użyte jako przedrostki amplifikacji, ponieważ same są nazwane według nomenklatury zamiennej’a’ szkieletu, na przykład związki heteromonocykliczne mające więcej niż dziesięć atomów i policykliczne układy von Baeyera.

Ogólne zasady, konwencje i reguły opisujące nomenklaturę zamienną ‘a’ szkieletu w podrozdziale P-15.4.

P-26.5.1 Uproszczone nazwy fanów nazywa się nomenklaturą zamienną ‘a’ szkieletu w dwóch etapach. Najpierw nazywa się macierzysty fan węglowodorowy, a następnie heteroatomy wskazuje się nierozłącznymi przedrostkami ‘a’ umieszczonymi na początku tak stworzonej nazwy. Lokanty dla heteroatomów przypisuje się zgodnie z numerowaniem uproszczonego szkieletu fanu.

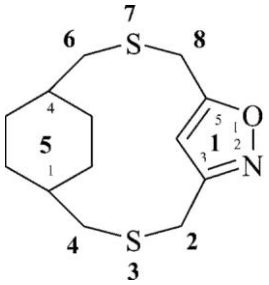
Przykłady:

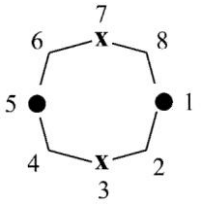




Etap 1: 1,7(1),3,5(1,4)tetrabenzenaheptafan
Etap 2: 2,4,6-tritia-1,7(1),3,5(1,4)tetrabenzenaheptafan (PIN)

uproszczony szkielet
• = superatom
x = heteroatom

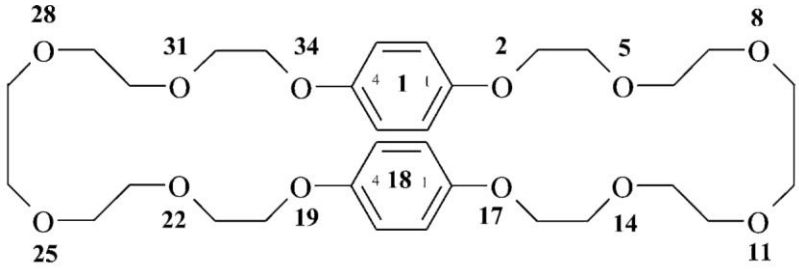


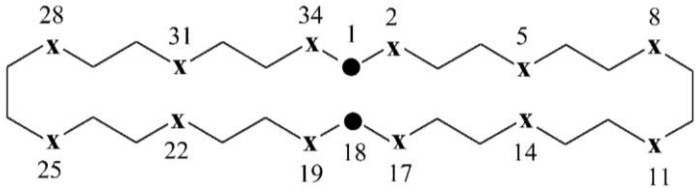


uproszczony szkielet
• = superatom
x = heteroatom

Etap 1: 1(3,5)[1,2]oksazola-5(1,4)-cykloheksanacyklooktafan

Etap 2: 3,7-ditia-1(3,5)[1,2]oksazola-5(1,4)-cykloheksanacyklooktafan (PIN)





uproszczony szkielet
• = superatom
x = heteroatom

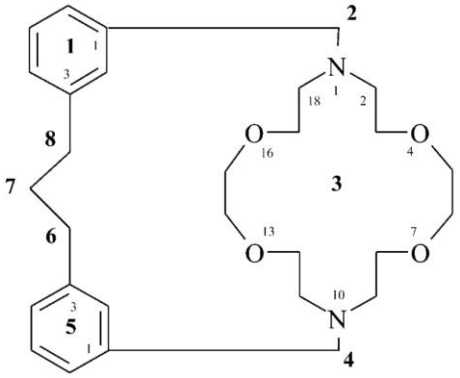
Etap 1: 1,18(1,4)-dibenzenacyklotetratriakontafan

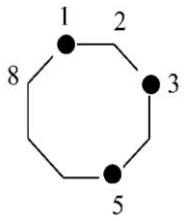
Etap 2: 2,5,8,11,14,17,19,22,25,28,31,34-dodekaoksa-1,18(1,4)-dibenzenacyklotetratriakontafan (PIN)

P-26.5.2 Nomenklatura zamienna ‘a’ szkieletu dla amplifikantów

Lokanty dla heteroatomów w amplifikantach przypisuje się zgodnie z numerowaniem uproszczonego szkieletu, a pozycje heteroatomów w amplifikantach postępując zgodnie z P-26.4 dla lokantów podstawników. Tak więc pozycje heteroatomów w amplifikantach opisuje się złożonymi lokantami.

Przykład:





uproszczony szkielet
• = superatom

Etap 1: 3(1,10)-cyklooktadekana-1,5(1,3)-dibenzenacyclooktafan

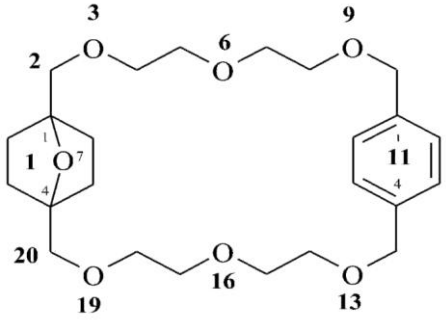
Etap 2: $3^4,3^7,3^{13},3^{16}$-tetraoksa-$3^1,3^{10}$-diaza-3(1,10) -cyklooktadekana-1,5(1,3)-dibenzenacyclooktafan (PIN)

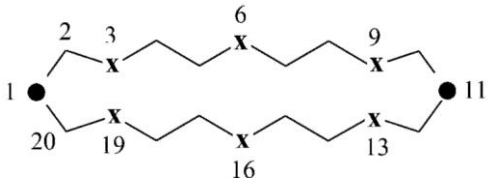
> **Uwaga:** Ponieważ numerowanie heteroamplifikantu jest ustalone przez lokanty odpowiedniego amplifikantu węglowodorowego, numerowanie heteroatomów może nie odpowiadać numerowaniu samego związku heteromonocyklicznego.

P-26.5.3 Jednoczesna zamiana ‘a’ szkieletu w uproszczonym szkielecie i w amplifikancie.

Kiedy zamiana szkieletu zachodzi zarówno w uproszczonym szkielecie jak i amplifikancie stosuje się dwie reguły, P-26.5.1 i P-26.5.2.

Przykład:





uproszczony szkielet
• = superatom
x = heteroatom

Etap 1: 1(1,4)bicyklo[2.2.1]heptana-11(1,4)-benzenacykloikozafan

Etap 2: 1^7,3,6,9,13,16,19-heptaoksa-1(1,4)bicyklo[2.2.1]heptana-11(1,4)-benzenacykloikozafan (PIN)

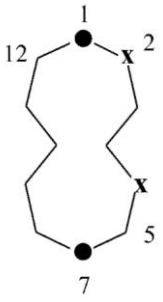
P-26.5.4 Numerowanie macierzystego wodorku heterofanu z uwzględnieniem heteroatomów

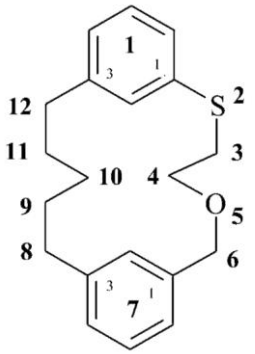
Jeżeli istnieje alternatywa w numerowaniu heterocyklicznych amplifikantów nazwanych według nomenklatury zamiennej ‘a’ szkieletu lub w numerowaniu uproszczonego szkieletu fanu, w którym dokonała się zamiana ‘a’ szkieletu, stosuje się kolejno poniższe kryteria aż do podjęcia decyzji.

P-26.5.4.1 Najniższe lokanty przypisuje się heteroatomom rozpatrywanym bez względu na ich rodzaj, po pierwsze zestawowi podstawowych lokantów heteroatomów, to jest lokantom z uproszczonego szkieletu (bez żadnych górnych indeksów) i wtedy, o ile te lokanty są identyczne,

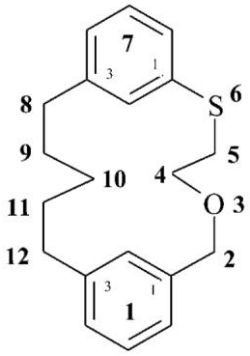
uwzględnia się pełny zestaw lokantów heteroatomów, obejmujący zarówno numery podstawowe jak i te z górnymi indeksami.

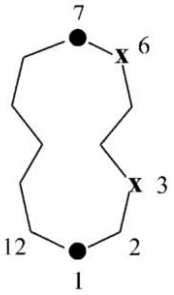
Przykłady:





nie





uproszczony szkielet
● = superatom
x = heteroatom

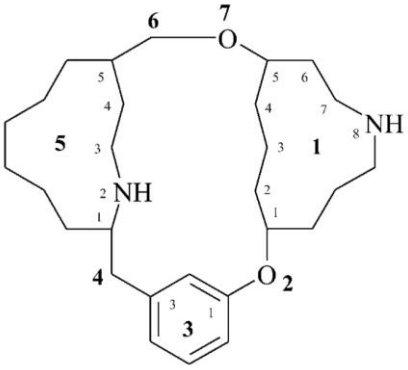
I

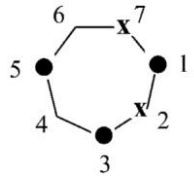
II

uproszczony szkielet
● = superatom
x = heteroatom

Etap 1: 1,7(1,3)-dibenzenacyklododekafan (**I**) i (**II**)

Etap 2: 5-oksa-2-tia-1,7(1,3)-dibenzenacyklododekafan (PIN)
[nie 3-oksa-6-tia-1,7(1,3)-dibenzenacyklododekafan,; zestaw lokantów heteroatomów w (**I**), ‘2,5’ jest niższy od zestawu lokantów w (**II**), ‘3,6’]

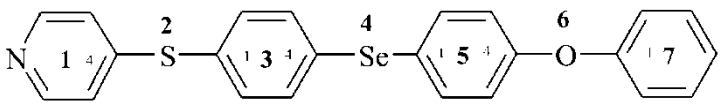


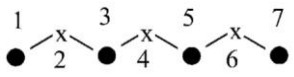


uproszczony szkielet
● = superatom
x = heteroatom

Etap 1: 1,5(1,5)-dicykloundeka-3(1,3)-benzenacycloheptafan

Etap 2: 2,7-dioksa-1^{8},5^{2}-diaza-1,5(1,5)-dicykloundekana-3(1,3)-benzenacycloheptafan (PIN)
[nie 4,6-dioksa-1^{2},5^{8}-diaza-1,5(1,5)-dicykloundekana-3(1,3)-benzenacycloheptafan; podstawowy zestaw lokantów heteroatomów w PIN, wymienianych – dla porównania – w rosnącym porządku, ‘1,2,5,7’ jest niższy od zestawu lokantów ‘1,4,5,6’





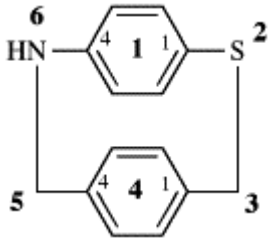
uproszczony szkielet
● = superatom
x = heteroatom

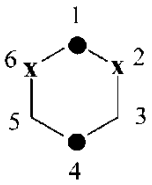
6-oksa-2-tia-4-selena-1(4)-pirydyna-3,5(1,4),7(1)-tribenzenaheptafan (PIN)

[nie 2-oksa-6-tia-4-selena-7(4)-pirydyna-1(1),3,5(1,4)-tribenzenaheptafan (PIN); starszy amplifikant ‘pirydyna’ musi otrzymać niższy lokant]

P-26.5.4.2 – Najniższe lokanty przypisuje się heteroatomom rozpatrywanym w porządku starszeństwa: O > S > Se > Te > N > P > As > Sb >Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al > Ga > Tl (patrz P-15.4), najpierw w odniesieniu do zestawu podstawowych lokantów dla heteroatomów, to jest lokantów w uproszczonym szkielecie (lokanty bez górnych indeksów),a następnie, jeżeli te lokanty są identyczne, do pełnego zestawu lokantów heteroatomów, zawierającego pierwotne lokanty i lokanty z indeksami górnymi (patrz P-26.4.3.3).

Przykłady:

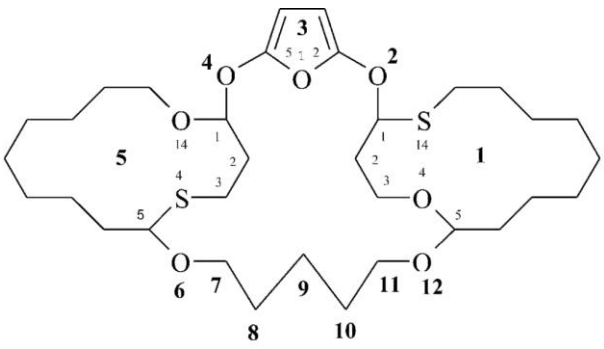




uproszczony szkielet
• = superatom
x = heteroatom

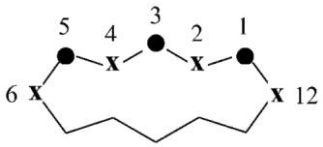
Etap 1: 1,4(1,4)-dibenzenacycloheksafan

Etap 2: 2-tia-6-aza-1,4(1,4)-dibenzenacycloheksafan;
[nie 6-tia-2-aza-1,4(1,4)-dibenzenacycloheksafan; ponieważ przedrostek zamiany ‘a’ ‘tia’jest starszy od ‘aza’ w nomenklaturze zamiennej ‘a’ szkieletu (patrz P-15.4), musi otrzymać niższy lokant]

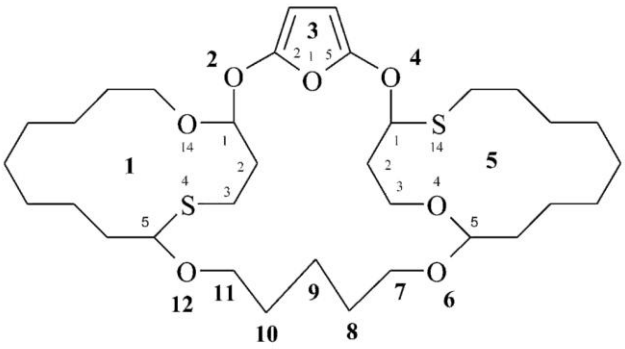


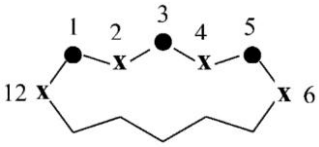
I

nie



uproszczony szkielet
● = superatom
x = heteroatom

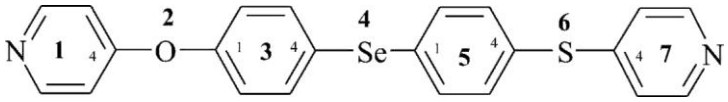


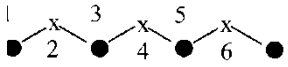


uproszczony szkielet
● = superatom
x = heteroatom

II

Etap 1: 3(2,5)-furana-1,5(1,5)dicyklotetradekanacyclododekafan
Etap 2: 1^{4},2,4,5^{14},6,12-heksaoksa-1^{14},5^{4}-ditia-3(2,5)-furana-1,5(1,5)dicyklotetradekana-cyclododekafan (**I**) (PIN)
[nie 1^{14},2,4,5^{4},6,12-heksaoksa-1^{4},5^{14}-ditia-3(2,5)-furana-1,5(1,5)dicyklotetradekana-cyclododekafan (**II**); zastosowanie P-26.5.4.1 pokazuje, że zarówno podstawowe zestawy lokantów jak i podstawowe zestawy lokantów zawierające złożone lokanty dla heteroatomów bez uwzględniania rodzaju heteroatomów są takie same dla obu nazw, czyli, odpowiednio, '1,1,2,4,5,5,6,12' i '1^{4},1^{14},2,4,5^{4},5^{14},6,12'; ale dla zestawów lokantów zawierających złożone lokanty, zestaw lokantów dla przedrostka 'oksa' w (**I**), PIN, '1^{4},2,4,5^{14},6,12' jest niższy niż zestaw lokantów dla 'oksa'' w (**II**), '1^{14},2,4,5^{4},6,12]'





uproszczony szkielet
● = superatom
x = heteroatom

2-oksa-6-tia-4-selena-1,7(4)dipirydyna-3,5(1,4)dibenzenaheptafan (PIN)
[nie 6-oksa-2-tia-4-selena-1,7(4)dipirydyna-3,5(1,4)dibenzenaheptafan; najstarszy przedrostek zamiany 'a' musi otrzymać najniższy lokant]

P-26.6 INNE ASPEKTY NOMENKLATURY FANÓW

Część II nomenklatury fanów, odn. 6, dyskutuje (1) macierzyste wodorki fanów podstawione grupami charakterystycznymi wskazywanymi przyrostkami. Przykłady podano w P-62.2.5.3 dla amin, w P-63.1.2 dla związków hydroksylowych i w P-64.2.2.3 dla ketonów; i (2) modyfikacje stopnia hydrogenacji; temat bardziej szczegółowo rozwinięty w P-31.2.3.3.4.

P-27. FULLERENY

P-27.0 WPROWADZENIE

Ten rozdział bazuje na publikacji 'Phane nomenclature. Part I. Phane parent names' (odn. 5) oraz nowego wydania z 2012 roku i nie zawiera żadnych nowości ani modyfikacji w stosunku do tych zaleceń.

Wstępne opracowanie nomenklatury i terminologii fullerenów opublikowano w 1997 roku (odn. 25), Ten rozdział opiera się na zaleceniach IUPAC z 2002 roku (odn. 10, 11), które

szczegółowo opisują dwa fullereny, czyli najbardziej znany fulleren o 60 atomach węgla i jeden z jego homologów C_{70}.

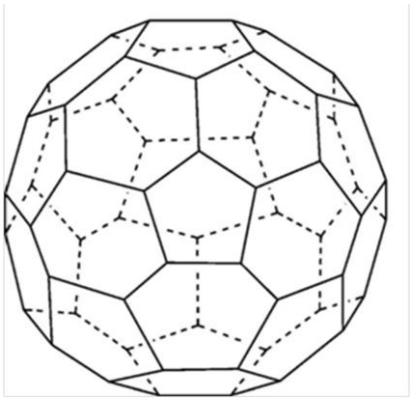
W tym rozdziale omówimy tylko macierzyste wodorki (odn. 10). Pochodne opisane są w rozdziale P-6, a rodniki i jony w rozdziale P-7. W rozdziale P-9 w dyskusji o notacji konfiguracji jest też krótka wzmianka o fullerenach.

P-27.1 Definicje
P-27.2 Nazwy fullerenów
P-27.3 Numerowanie fullerenów
P-27.4 Fullereny modyfikowane strukturalnie
P-27.5 Zastąpienie atomów szkieletu
P-27.6 Przyłączenie pierścieni i układów pierścieni do fullerenów
P-27.7 Inne aspekty nomenklatury fullerenów

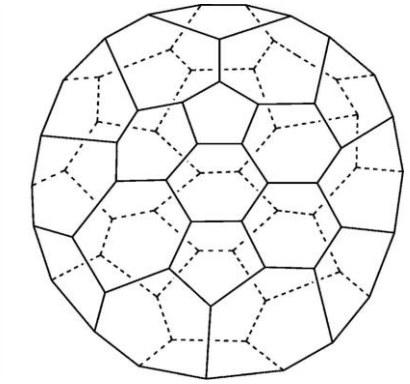
P-27.1 DEFINICJE

P-27.1.1 Fullereny

Fullereny są związkami złożonymi wyłącznie z parzystej liczby atomów węgla, które tworzą klatkowy policykliczny układ skondensowanych pierścieni z dwunastu pierścieni pięcioczłonowych i pozostałych pierścieni sześcioczłonowych (patrz odn. 10). Archetypicznym przykładem jest [60]fulleren, w którym atomy i wiązania nakreślają ścięty ikozahedron. Termin został rozszerzony tak, aby zawierał każdą zamkniętą strukturę klatkową zbudowaną wyłącznie z trikoordynacyjnych atomów węgla.



(C_{60}-*I*$_h$)[5,6]fulleren (PIN)



(C_{70}-*D*$_{5h(6)}$)[5,6]fulleren (PIN)

P-27.1.2 Fullerany

Fullerany są w pełni nasyconymi fullerenami, na przykład $C_{60}H_{60}$.

P-27.1.3 Fulleroidy

Heterofullereny, norfullereny, homofullereny i sekofullereny nazywa się fulleroidami (niby--fullerenami), ponieważ ich struktury przypominają fullereny, ale nie pasują do definicji fullerenów podanej powyżej. Wygodnie jest traktować je jako fulleroidy i nazywać jako modyfikowane fullereny.

P-27.2 NAZWY FULLERENÓW

P-27.2.1 Nazwy systematyczne

Zalecane systematyczne nazwy fullerenów składają się z liczby atomów węgla, symbolu grupy punktowej, rozmiarów pierścieni, względnego ułożenia pierścieni i terminu ‘fulleren’, wszystko to łączy się, co daje nazwy takie jak (C_{60}-I_h)[5,6]fulleren (PIN) i (C_{70}-$D_{5h(6)}$)[5,6] fulleren (PIN) dla dwóch fullerenów omawianych w tym podrozdziale. Przedrostek w nawiasie podaje liczbę atomów węgla i symbol grupy punktowej a w nawiasie klamrowym liczby wskazujące wielkości pierścieni w fullerenach. Ten ostatni nawias jest ważny dla fullerenów o pierścieniach różnych od piecio- i sześcioczłonowych. Dolny indeks (6) po symbolu grupy punktowej D_{5h} w ostatniej nazwie wskazuje, że pięcioczłonowy pierścień na pięciokrotnej osi symetrii jest otoczony przez pierścienie sześcioczłonowe. To odróżnia ten fulleren od izomerycznego fullerenu, w którym pięcioczłonowy pierścień na pięciokrotnej osi symetrii otaczają pierścienie pięcioczłonowe i który ma nazwę (C_{70}-$D_{5h,5}$)[5,6] fulleren (PIN)

Te zalecane nazwy przekazują te same informacje co nazwy Chemical Abstracts Service (CAS), ale w innym formacie. Nazwy CAS dla nazwanych poprzednio fullerenów to [5,6] fulleren-C_{60}-I_h i [5,6]fulleren- C_{70}-$D_{5h,5}$ (patrz odn. 10).

P-27.2.2 Nazwy zwyczajowe

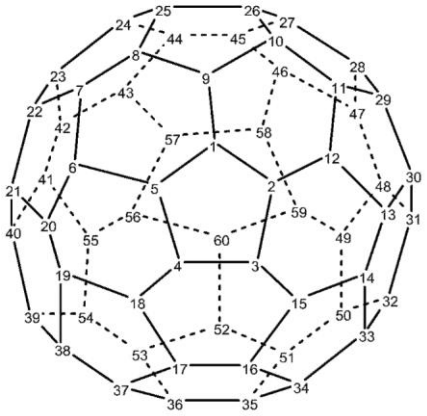
Nazwy [60-I_h]fulleren i [70-D_{5h}]fulleren (skracane do [60]fulleren i [70]fulleren) podane w IUPAC Preliminary Survey (odn. 25) są nazwami po raz pierwszy wprowadzonymi do literatury dla (C_{60}-I_h)[5,6]..... i (C_{70}-$D_{5h(6)}$)[5,6].....fullerenów. Opierały sie one na ograniczonej definicji fullerenów ograniczonej do pięcio- i sześcioczłonowych pierścieni. A ponieważ te nazwy nie podają istotnych informacji traktuje sie je jako nazwy zwyczajowe tylko dla tych specyficznych związków.

P-27.2.3 Preferowane nazwy IUPAC

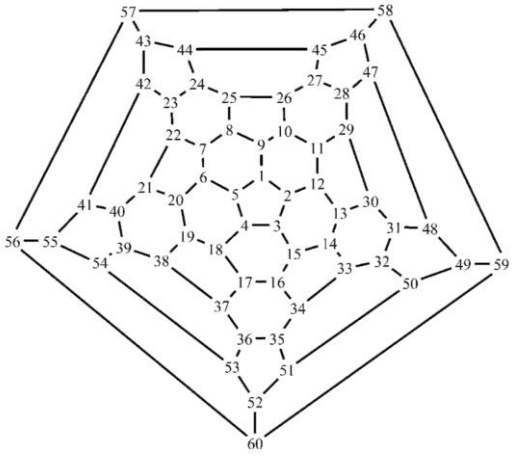
Systematyczne nazwy IUPAC preferuje się względem nazw CAS i nazw zwyczajowych. Te nazwy nie są w pełni wymienne. Każda z nich opiera się na specyficznej metodologii tworzenia nazw pochodnych. I, co najważniejsze, opierają się na różnych systemach numerowania, jednym dla nazw systematycznych IUPAC i CAS, innym dla nazw zwyczajowych (patrz P-27.3). Preferowanymi nazwami dla fullerenów i ich pochodnych są te, które, gdy istnieje możliwość wyboru, stosują preferowane składniki (patrz P-52.2.6).

P-27.3 NUMEROWANIE FULLERENÓW

Systematyczne numerowanie jest nie do końca rozwiązanym problemem w nomenklaturze fullerenów. Celem jest osiągnięcie ciągłego numerowania i znalezienie dobrze zdefiniowanego punktu początkowego numerowania dla wszystkich fullerenów. Kryteria dla numerowania (C_{60}-I_h)[5,6]fullerenu (PIN) i (C_{70}-$D_{5h(6)}$)[5,6] fullerenu (PIN) są dyskutowane w publikacji IUPAC (odn. 10), Należy zwrócić uwagę, że systematyczne numerowanie stosowane w nazwach systematycznych IUPAC pochodzi z systemu opracowanego przez Chemical Abstracts Service i że oba systemy są identyczne dla tych dwóch specyficznych fullerenów. Numerowanie związane z nazwami zwyczajowymi jest różne, ponieważ bazuje na zasadach takich jak ‘najbardziej reaktywne wiązanie’. Oba systemy numerowania są pokazane poniżej na trójwymiarowych wzorach i prezentacjach Schlegela.

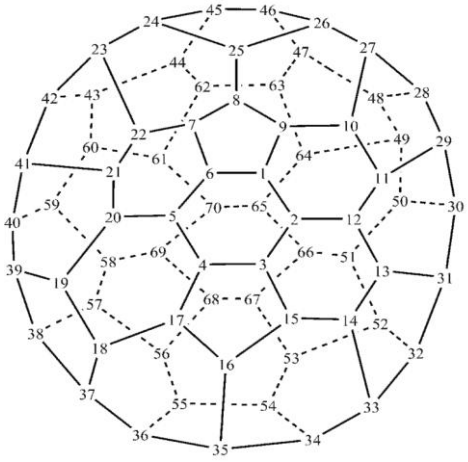


Prezentacja 3-D

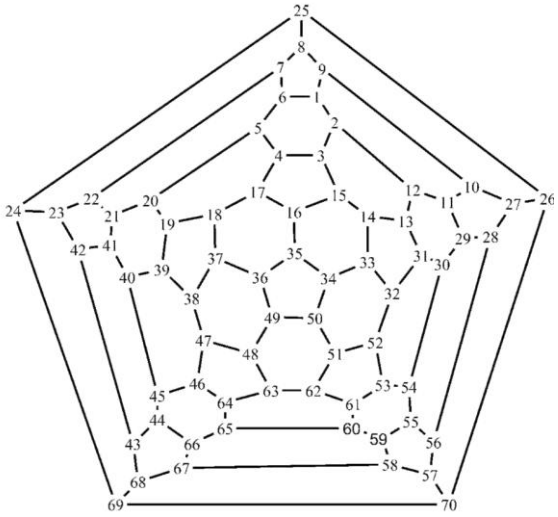


Prezentacja Schlegela

{(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren (PIN); systematyczne numerowanie}

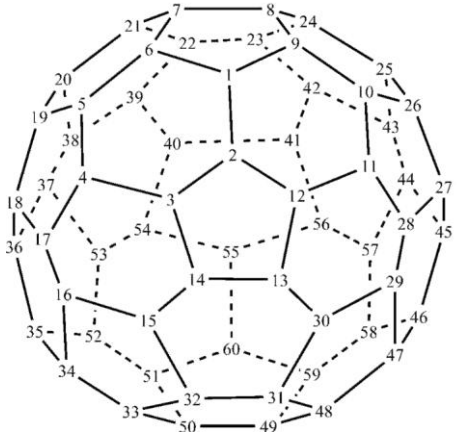


Prezentacja 3-D

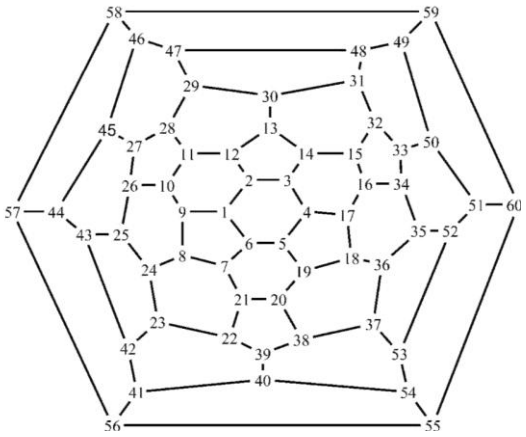


Prezentacja Schlegela

{(C_{70}-$D_{5h(6)}$)[5,6] fulleren (PIN); systematyczne numerowanie}

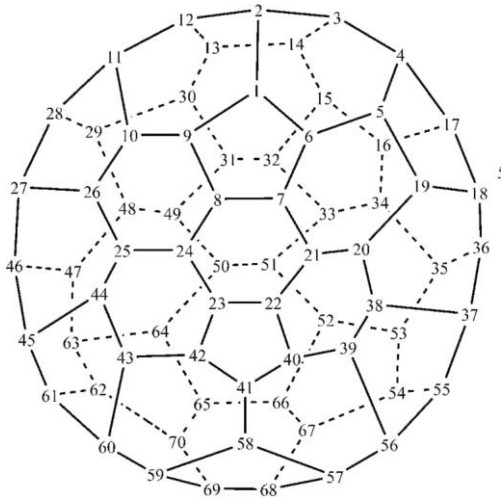


Prezentacja 3-D

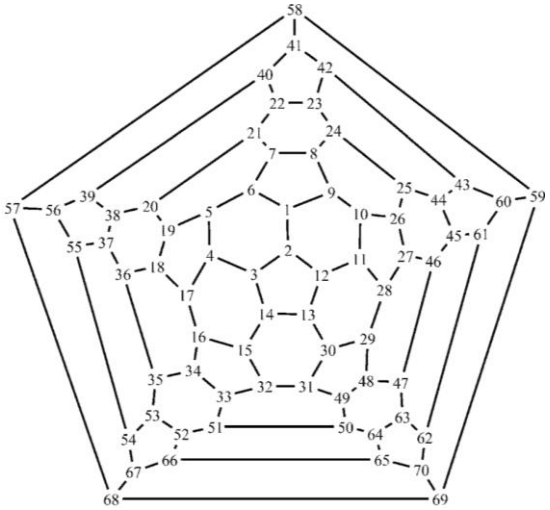


Prezentacja Schlegela

[60]fulleren (zwyczajowe numerowanie)



Prezentacja 3-D



Prezentacja Schlegela

[70-D_{5h}]fulleren (zwyczajowe numerowanie)

Specyficzne numerowanie wielu innych struktur fullerenów z osiami symetrii obrotowej , włączając te z nieciągłą ścieżką numerowania (według systematycznych zasad) , a także fullereny z grupami symetrii punktowej C_s i C_1 zostało opublikowane (odn. 11).

P-27.4 FULLERENY MODYFIKOWANE STRUKTURALNIE

P-27.4.0 Wprowadzenie
P-27.4.1 Homofullereny
P-27.4.2 Norfullereny
P-27.4.3 Sekofullereny

P-27.4.4 Cyklofullereny
P-27.4.5 Kombinacja operacji modyfikujących strukturę

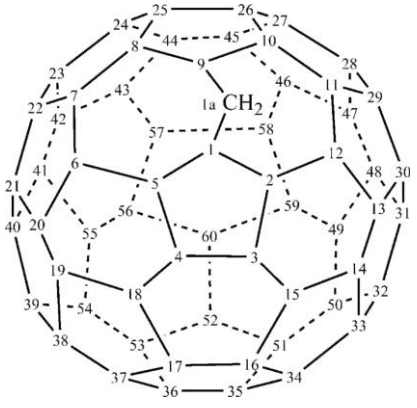
P-27.4.0 Wprowadzenie

Addycja lub usunięcie atomów wegla z określonego fullerenu nie tworzy nowego układu fullerenu opisywanego przez nowe lokanty atomów węgla czy nowy symbol grupy punktowej, a opisuje się je modyfikując nazwę niemodyfikowanego fullerenu, z użyciem nierozłącznych przedrostków ‘homo’ i ‘nor’. W ten sposób fullereny staja się macierzystymi strukturami analogicznie do podstawowych struktur w nomenklaturze produktów naturalnych (patrz Rozdział P-10). Podobnie, rozerwanie wiązania i tworzenie nowego wiązania w specyficznych sytuacjach wskazuje się nierozłącznymi przedrostkami ‘seko’ i ‘cyklo’, które też są używane w nomenklaturze produktów naturalnych. Przeciwnie do określonych ograniczeń w używaniu przedrostków ‘homo’, ‘nor’, ‘seko’i ‘cyklo’w nomenklaturze związków naturalnych, w nomenklaturze fullerenów takich ograniczeń nie ma.

P-27.4.1 Homofullereny

Zastąpienie wiązania węgiel-węgiel fullerenu grupą metylenową (-CH_2-) opisuje się dodając do nazwy macierzystego fullerenu nierozłączny przedrostek ‘homo’. Zachowane jest oryginalne numerowanie macierzystego fullerenu. Położenie operacji homo opisuje się zespolonym lokantem utworzonym zgodnie z metodą opracowaną dla wbudowania grupy metylenowej do łącznika wiązania podstawowej struktury w nomenklaturze produktów naturalnych (patrz P-101.3.2). Przyłączenie dwóch lub większej liczby grup metylenowych wskazuje się przedrostkami zwielokrotniającymi ‘di’, ‘tri’ etc. umieszczanymi bezpośrednio przed przedrostkami ‘homo’. Zespolony lokant tworzy się dodając literę ‘a’ (‘b’, ‘c’ etc. jeżeli więcej niż jedna grupa zastępuje wiązanie) do pary lokantów będących najniższymi lokantami zgodnymi z numerowaniem fullerenu i zamykając wyższą liczbę w nawiasie, na przykład ‘1(9)a’. Takie zespolone lokanty muszą być użyte w nazwach macierzystych związków, ale jeżeli nie ma niejasności, we wzorach strukturalnych i przy wymienianiu podstawników można stosować proste lokanty utworzone przez dodanie litery ‘a’ do najniższego lokantu, na przykład ‘1a’. W nomenklaturze produktów naturalnych lokanty do określania addycji grupy metylenowej stosuje się inaczej (patrz P-101.3.2). CAS również stosuje inne lokanty i nie można ich stosować do opisu zastąpienia grupami metylenowymi w preferowanych przez IUPAC nazwach fullerenów (patrz Fu-4.1, odn. 10).

Przykład:



1(9)a*H*-1(9)a-homo(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren

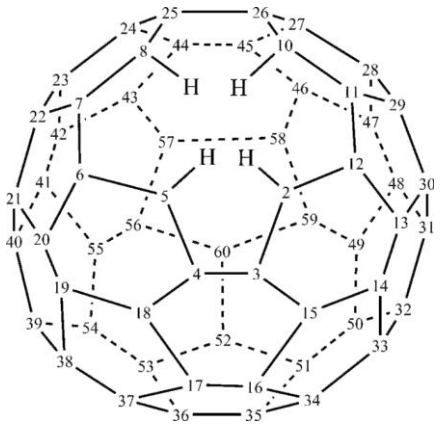
P-27.4.2 Norfullereny

Nierozłączny przedrostek ‘nor’ oznacza usunięcie jednego atomu węgla ze struktury fullerenu; jednakże w odróżnieniu od nomenklatury produktów naturalnych (patrz P-101.3.1.1) wiązania pozostałe po usunięciu tego atomu nie łączą się powtórnie. W rezultacie łączalność pozostałych atomów może się zmniejszyć od trzech do dwóch, co wymaga obecności atomów wodoru. Parzysta liczba atomów wodoru jest oczywista w nazwie; jeżeli jest nieparzysta, jeden atom jest wskazywany w nazwie jako wskazany atom wodoru ponieważ jeden atom węgla zmienił hybrydyzację z sp^2 w sp^3. Łączalność trzy może być nasycona heteroatomem takim jak azot czy bor, a łączalność dwa heteroatomem takim jak tlen czy siarka; te heteroatomy są wprowadzane w oddzielnej operacji. Lokanty atomów powinny być możliwie niskie. Usunięcie dwóch lub więcej atomów węgla wskazuje się przedrostkami zwielokrotniającymi ‘di’, ‘tri’ itd. umieszczonymi przed przedrostkiem ‘nor’.

Przy tworzeniu preferowanej nazwy IUPAC nie ma sensu określanie dokładnej liczby atomów, które mogłyby być usunięte w operacji ‘nor’; w końcu łatwiejszą do zrozumienia niż nazwa polinorfullerenu może się okazać nazwa utworzona według systematycznej nomenklatury pierścieni. Realistyczna liczba usuwanych atomów zależałaby bardzo od tego, czy usuwane są bloki atomów czy izolowane atomy węgla. Użycie przedrostka ‘nor’ w generacji preferowanych nazw IUPAC fullerenów patrz P-52.2.6.1.

W nomenklaturze produktów naturalnych użycie przedrostka ‘nor’ jest zupełnie inne i nie powinno być stosowane, lub adaptowane, do nomenklatury fullerenów.

Przykład:



1,9-dinor(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren (PIN)

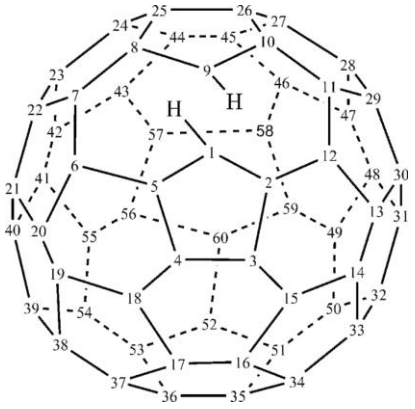
P-27.4.3 Sekofullereny

Nierozłączny przedrostek ‘seko’ wskazuje rozerwanie jednego wiązania w fullerenie. Zachowuje się numerowanie macierzystego fullerenu, a jeżeli istnieje wybór, operacji ‘seko’ przypisuje sie możliwie najniższe lokanty. Wymagane wiązalności pozostających atomów z łączalnością dwa nasyca się atomami wodoru po przegrupowaniu podwójnych wiązań. Obecność atomów wodoru jest zawarta w nazwie sekofullerenu. Rozerwanie dwóch lub większej liczby wiązań wskazuje się przedrostkami zwielokrotniającymi ‘di’, ‘tri’ etc. przed przedrostkiem ‘seko’.

Podobnie jak w operacji 'nor' nie ma sensu określanie dokładnej liczby wiązań, które mogłyby być rozerwane w operacji ‘seko’ przy tworzeniu preferowanej nazwy IUPAC; w końcu łatwiejszą do zrozumienia niż nazwa polisekofullerenu może się okazać nazwa utworzona według systematycznej nomenklatury pierścieni. Realistyczna liczba usuwanych atomów zależałaby bardzo od tego, które atomy węgla są rozrywane. Użycie przedrostka ‘seko’ w generacji preferowanych nazw IUPAC fullerenów patrz P-52.2.6.2.

Użycie przedrostka ‘seko’ w nomenklaturze produktów naturalnych jest zupełnie inne i nie powinno być stosowane, lub adaptowane, do nomenklatury fullerenów.

Przykład:



1,9-seko(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren (PIN)

P-27.4.4 Cyklofullereny

Nierozłączny przedrostek ‘cyklo’wskazuje na utworzenie wiązania pomiędzy dwoma atomami modyfikowanego fullerenu albo struktury multifullerenowej. Prawie zawsze występuje w połączeniu z jednym lub większą liczbą przedrostków modyfikujących strukturę: ‘homo’, 'nor' i ‘seko’. Tworzenie jednego, dwóch lub większej liczby wiązań wskazuje sie przedrostkami zwielokrotniającymi ‘di’, ‘tri’ etc. umieszczonymi przed przedrostkiem 'cyklo'. Jak dotąd nie jest znany fulleren, który miałby w nazwie tylko przedrostek 'cyklo'. Patrz przykład w P-27.4.5.

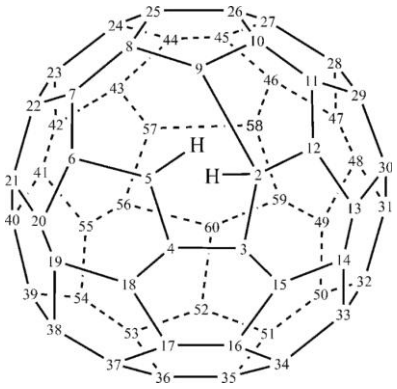
P-27.4.5 Kombinacja operacji modyfikujących strukturę

Kiedy w strukturze fullerenu przeprowadzono dwie lub więcej operacji, przedrostki określające te operacje wymienia się w nazwie w kolejności „cyklo', ‘seko’, homo' i 'nor'. Jest to odwrotność porządku, który operacje wskazane przedrostkami mają przy wyborze najniższych lokantów. Przedrostki 'nor' są pierwsze przy wyborze najniższych lokantów, a przedrostki ‘homo’ są starsze od ‘seko’ i ‘cyklo’w kolejce do niskich lokantów, ponieważ przedrostki ‘homo’ mogą być potrzebne do tych ostatnich operacji. Lokanty dla przedrostków ‘seko’ i ‘cyklo’są określane przez najniższy zestaw lokantów, a następnie przez porządek wymieniania przedrostków w nazwie.

I tak jak poprzednio nie ma sensu określanie dokładnej liczby operacji, które mogłyby być przeprowadzone w macierzystej strukturze fullerenu aby umożliwić utworzenie preferowanych nazw IUPAC; w końcu łatwiejszą do zrozumienia niż nazwa polisekofullerenu może się okazać nazwa utworzona według systematycznej nomenklatury pierścieni. Realistyczna liczba zależałaby bardzo od rodzaju połączonych operacji. Użycie przedrostków modyfikujących strukturę w tworzeniu preferowanych nazw IUPAC fullerenów patrz P-52.2.6.

Reguły kombinacji przedrostków operacji modyfikujących strukturę w nomenklaturze związków naturalnych są zupełnie inne i nie powinny być stosowane, lub adaptowane, do nomenklatury fullerenów.

Przykład:

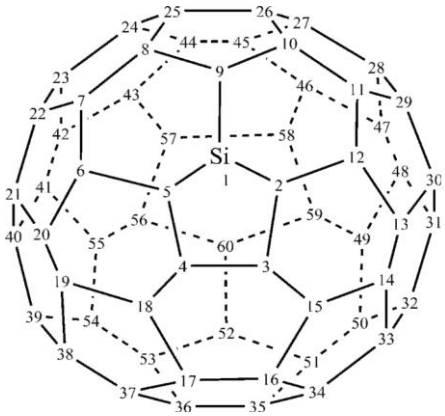


2*H*-2,9-cyklo-1-nor(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren (PIN)

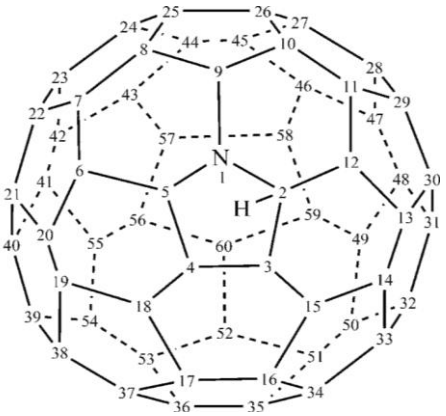
P-27.5 ZAMIANA ATOMÓW SZKIELETU

P-27.5.1 Fullereny, w których atomy węgla zostały zamienione na jeden lub więcej heteroatomów nazywa się ‘heterofullerenami’. Do nazywania fullerenów, w których atomy węgla zostały zamienione na heteroatomy stosuje się nomenklaturę zamienną ‘a’ szkieletu, zarówno dla standardowych wiązalności (patrz P-15.4) jak i dla wiązalności wskazywanych konwencją λ (patrz P-14.1). Jeżeli w macierzystym fullerenie podwójne wiązania są obecne lub możliwe to macierzystą nazwą jest ‘fulleren’; jeżeli podwójne wiązania nie są możliwe, macierzystą nazwą jest ‘fulleran’. Termin ‘heteroatomy’ obejmuje wszystkie pierwiastki, które mogą być trikoordynacyjne, w tym metale i semimetale. Nazwy zamienne fullerenów, w których wszystkie atomy węgla zostały zamienione na takie same lub różne heteroatomy, są nazwami wstępnie wybranymi (patrz P-12.2). Zastąpienie atomów węgla triwalencyjnymi heteroatomami może wywołać potrzebę wskazanych atomów wodoru i niższych lokantów dla nich.

Przykłady:



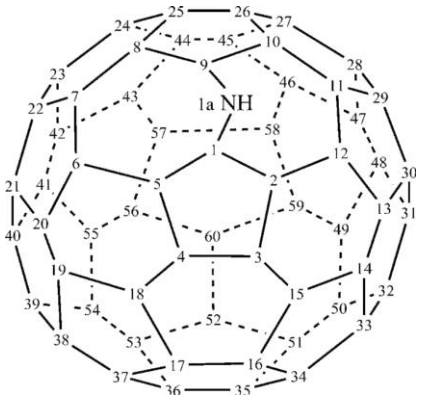
sila(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren (PIN)



2*H*-1-aza(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren (PIN)

P-27.5.2 Kiedy przedrostki ‘homo’, ‘nor’, ‘seko’ czy ‘cyklo’ występują łącznie z członami zamiennymi szkieletu, takimi jak ‘oksa’ lub ‘aza’, przedrostki zamienne wymienia się w nazwach w ich porządku starszeństwa, przed przedrostkami modyfikującymi strukturę. Przedrostki modyfikujące strukturę otrzymują niższe lokanty niż przedrostki zamiany.

Przykład:



1a*H*-1a-aza-1(9)a-homo(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren (PIN)

P-27.6 ADDYCJA PIERŚCIENI I ZESPOŁÓW PIERŚCIENI DO FULLERENÓW

Addycję pierścieni lub układów pierścieni do fullerenu wyraża się jako operację *orto* skondensowania, operację mostkowania albo operację spiro-skondensowania, jak opisano w tym rozdziale poprzednio.

P-27.6.1 Fullereny *orto* skondensowane z organicznymi pierścieniami lub układami pierścieni
P-27.6.2 Mostkowe fullereny
P-27.6.3 Spiro fullereny

P-27.6.1 Fullereny i modyfikowane fullereny *orto* skondensowane z organicznymi pierścieniami lub układami pierścieni

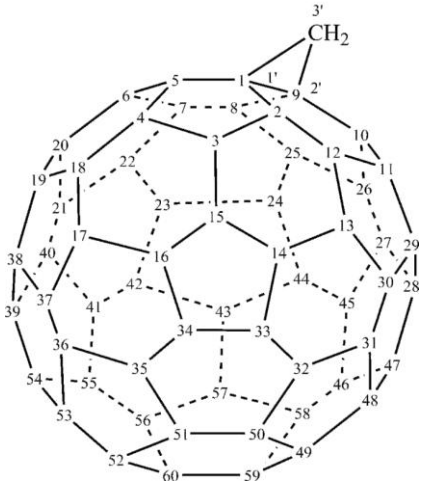
Fullereny lub modyfikowane fullereny, które dzielą sąsiadującą parę atomów z organicznym pierścieniem lub układem pierścieni nazywa się adaptując zasady nomenklatury skondensowanej opisane w P-25. Jak w normalnych organicznych układach pierścieni, parę atomów wspólnych dla fullerenu lub modyfikowanego fullerenu i organicznego pierścienia lub układu pierścieni traktuje się jako część obu składników. Jednakże inaczej niż w normalnych układach skondensowanych każdy komponent zachowuje swój własny układ wiązań i numerowanie. Ze względu na rodzaj wiązań w fullerenie wiązanie skondensowania jest zawsze wiązaniem pojedynczym a atomy skondensowania nie mogą przyjąć podwójnego wiązania ‘egzo’. Po kondensacji, komponenty nie-fullerenowe, inne niż alicykliczne bi- i policykliczne układy pierścieni, mają maksymalną liczbę nieskumulowanych wiązań podwójnych i, w miarę potrzeby, wymienia się wskazany atom wodoru.

Nazwy organicznych układów pierścieni, w tym pierścieni monocyklicznych i wszystkich układów pierścieni policyklicznych, z wyjątkiem spiranowych układów pierścieni, wymienia się zawsze jako przedrostki do nazwy fullerenu lub modyfikowanego fullerenu, który jest zawsze składnikiem macierzystym. Każdy system zachowuje swoją nazwę i numerowanie zarówno dla wskazania miejsc skondensowania jak i pozycji podstawników. Lokanty fullerenu lub modyfikowanego fullerenu są zawsze nieprimowane, primy dodaje się do skondensowanych pierścieni lub układów pierścieni, w opisanym poniżej porządku.

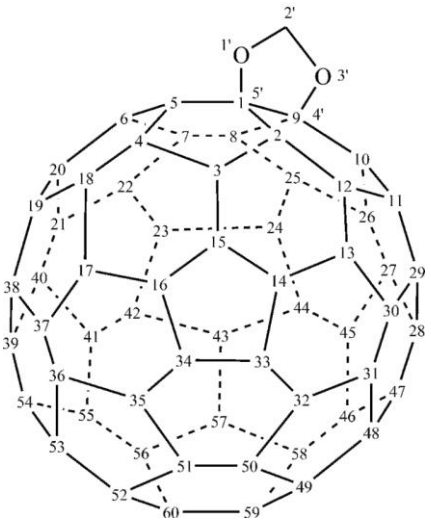
Metodologia stosowana do nazywania skondensowanych pochodnych fullerenu jest także używana do nazywania skondensowanych podstawowych struktur w nomenklaturze produktów naturalnych (patrz P-101.5). Należy pamiętać, że aby utworzyć nazwy IUPAC wszystkie zasady muszą być stosowane w całości jak opisano. Nazwy CAS są inne i bardziej zbliżone do normalnej operacji kondensacji, w której macierzystym komponentem jest starszy pierścień lub układ pierścieni. Przy takim postępowaniu należy używać nazwy CAS dla fullerenów i modyfikowanych fullerenów.

Poza tym można zastąpić operację kondensacji operacją mostkowania, na przykład wtedy, gdy komponentem pierścieniowym jest pierścień cyklopropanu lub oksirenu. W takich przypadkach mostkowanie przy użyciu przedrostków mostków ‘metano’ lub ‘epoksy’ (patrz P-25.4) jest ważną alternatywą; metoda ta była zalecana we wstępnym badaniu (patrz odn. 25) i może być stosowana w ogólnej nomenklaturze.

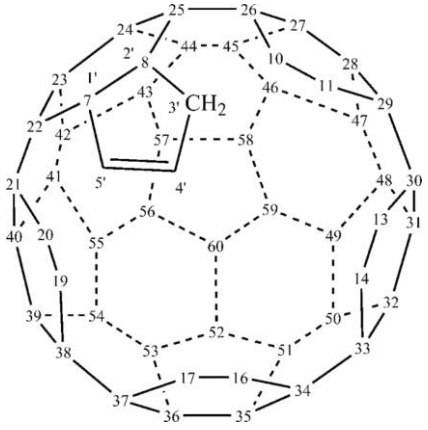
Przykłady:



3′*H*-cyklopropa[1,9](C_{60}-I_h)[5,6]fulleren (PIN)
1,9-metano(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren (patrz P-27.6.2)

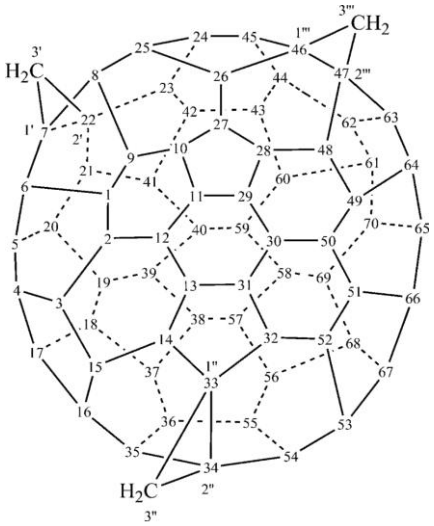


[1,3]dioksolo[4′,5′:1,9](C_{60}-I_h)[5,6]fulleren (PIN)
1,9-(oksymetylenooksy)(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren (patrz P-27.6.2))



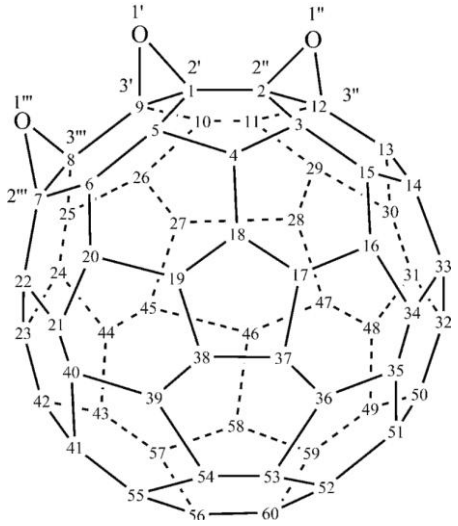
3′*H*-cyklopenta[7,8]-1,2,3,4,5,6,9,12,15,18-dekanor(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren (PIN)
7,8-(prop-1-en-1,3-diylo)-1,2,3,4,5,6,9,12,15,18-dekanor(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren (patrz P-27.6.2)

Kiedy dwa lub większa liczba takich samych komponentów nie-fullerenowych jest skondensowana z fullerenem, primy przypisuje się zgodnie z wzrastającą wartością niższego lokantu skondensowania fullerenu. Jeżeli do fullerenu dołączone są różne nie-fullerenowe komponenty, primy przypisuje się w alfanumerycznym porządku przedrostków skondensowania w nazwie czytanej od lewej do prawej strony, uwzgledniając kryterium wielokrotności tego samego nie-fullerenowego komponentu. Ta metodologia odnosi sie również do pierścieni i układów pierścieni skondensowanych z modyfikowanymi fullerenami.



Przykłady:

3′*H*,3″*H*,3‴*H*-tricyklopropa[7,22:33,34:46,47](C_{70}-I_h)[5,6]-fulleren (PIN)
7,22:33,34:46,47-tris(metyleno)(C_{70}-I_h)[5,6]-fulleren (patrz P-27.6.2)

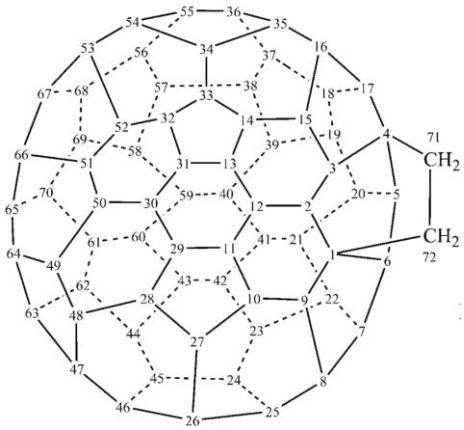


tris(oksireno)[2′,3′:1,9;2″,3″:2,12;2‴,3‴:7,8](C_{60}-I_h)[5,6]fulleren (PIN)
1,9:2,12:7,8-tris(oksy)(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren (patrz P-27.6.2)

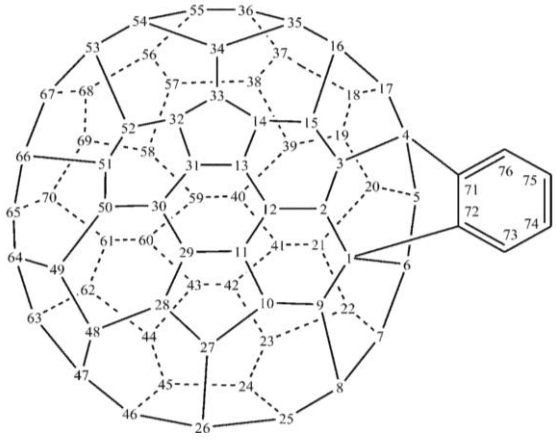
P-27.6.2 Mostkowane fullereny

Mostki pomiędzy nieprzyległymi atomami fullerenu lub modyfikowanego fullerenu nazywa sie i numeruje według ustalonych zasad i reguł dla mostkowanych układów pierścieni skondensowanych (patrz P-25.4). Numerowanie atomów mostka zaczyna się od numeru następującego po najwyższym numerze fullerenu i rozpoczyna się od atomu sąsiadującego z atomem fullerenu o najwyższym lokancie. Mostki pomiędzy pierścieniami skondensowanymi z fullerenem i macierzystym fullerenem, pomiędzy różnymi pierścieniami skondensowanymi z tym samym fullerenem, lub między dwoma lub większą liczbą fullerenów połączonych skondensowanymi pierścieniami lub układami pierścieni nazywa się stosując ustalone nazwy przedrostków mostków, ale numerowanie rozpoczyna się od atomu mostka sąsiadującego ze skondensowanym komponentem o najmniej primowanych lokantach i kontynuuje się od tego atomu.

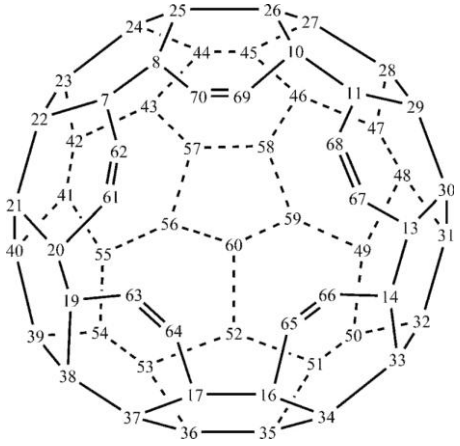
Przykłady:



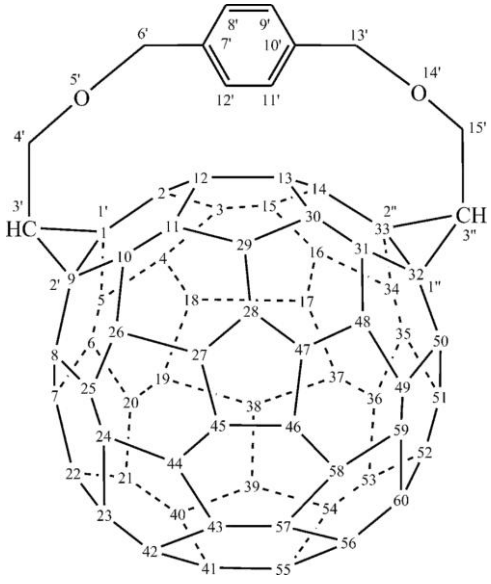
1,4-etano(C_{70}-$D_{5h(6)}$)[5,6]fulleren (PIN)



1,4-[1,2]benzeno(C_{70}-$D_{5h(6)}$)[5,6]fulleren



7,20:8,10:11,13:14,16:17,19-pentaeteno-1,2,3,4,5,6,9,12,15,18- dekanor(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren (PIN)



3′,3″-metanooksymetano[1,4]benzenometanooksymetano)-3′*H*,3″*H*-dicyklopropa[1,9:32,33](C_{60}-$D_{5h(6)}$)[5,6]fulleren (PIN)

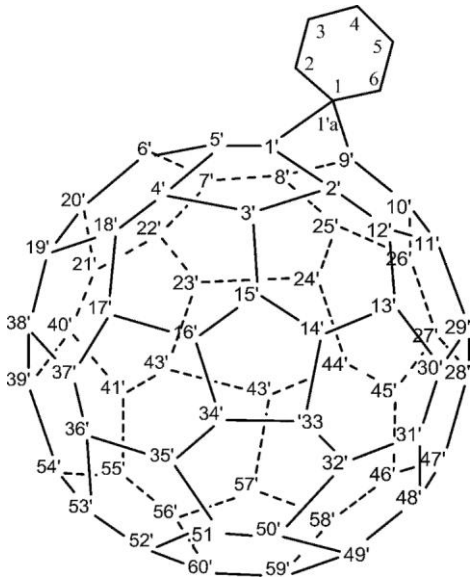
1,9:32,33-(etano-1,2,2-triyloksymetyleno-1,4-fenyleno-metylenooksyetano-1,2,2-triyl)(C_{60}-$D_{5h(6)}$)[5,6]fulleren

P-27.6.3 Spiro fullereny

Fullereny same nie mogą tworzyć spiro związków bezpośrednio z powodu ich specyficznej łączalności i, jak wspomniano wcześniej, układy spiro pierścieni nie kondensują z fullerenami.

Spiro fullereny utworzone z homofullerenów i fullerenów skondensowanych z układami pierścieni organicznych podlegają normalnej procedurze nazywania organicznych układów spiranowych zawierajacych co najmniej jeden policykliczny układ pierścieni, jak opisano w P-24.6. Macierzyste wodorki spiro fullerenów nie muszą mieć nieprimowanych lokantów ponieważ przy nazywaniu tego typu związków obowiązuje porządek alfanumeryczny.

Przykład:



spiro[cykloheksano-1,1′a-[1(9)a]homo(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren] (PIN)

P-27.7 INNE ASPEKTY NOMENKLATURY FULLERENÓW

Część II nomenklatury fullerenów, odn. 11, dyskutuje rolę numerowania szerokiego wyboru struktur fullerenów:

(1) Fullereny mające co najmniej jedną oś symetrii (C_n; n>1) i przyległą spiralną drogę numerowania

(2) Fullereny mające co najmniej jedną oś symetrii (C_n; n>1) ale nie mające przyległej spiralnej drogi numerowania

(3) Fullereny należące do grupy punktowej C_s i mające przyległą spiralną drogę numerowania

(4) Fullereny należące do grup punktowych C_i lub C_1 i mające przyległą spiralną drogę numerowania

P-28. ZESPOŁY PIERŚCIENI

P-28.0 Wprowadzenie
P-28.1 Definicje
P-28.2 Zespoły pierścieni złożone z dwóch identycznych układów cyklicznych
P-28.3 Nierozgałęzione zespoły pierścieni liczące od trzech do sześciu identycznych układów cyklicznych
P-28.4 Zespoły pierścieni identycznych układów cyklicznych modyfikowanych nomenklaturą zamienną ‘a’ szkieletu
P-28.5 Zespoły pierścieni złożone z więcej niż sześciu identycznych układów cyklicznych
P-28.6 Rozgałęzione zespoły pierścieni identycznych układów cyklicznych
P-28.7 Zespoły pierścieni nie identycznych układów cyklicznych

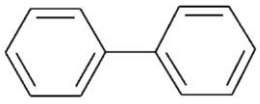
P-28.0 WPROWADZENIE

W tym podrozdziale opisano zespoły cyklicznych wodorków macierzystych połączonych pojedynczymi lub podwójnymi wiązaniami. Nazywa sie je stosując tak zwane ‘łacińskie przedrostki zwielokrotniające’ ‘bi’, ‘ter’, ‘quater’ etc. do wskazania liczby pierścieni lub układów pierścieni w zespole.

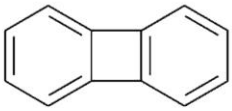
W podrozdziale tym stosuje się nazwy podstawników opisane później w P-29.

P-28.1 DEFINICJE

Dwa lub więcej układów cyklicznych (pojedynczych pierścieni lub układów skondensowanych, alicyklicznych układów von Baeyera, układów spiranowych, fanów, fullerenów), które są połaczone ze soba bezposrednio wiązaniami pojedynczymi lub podwójnymi nazywa się ‘zespołem pierścieni’, jeśli liczba takich bezpośrednich złączeń pierścieni jest mniejsza o jeden od liczby zaangażowanych pierścieni.



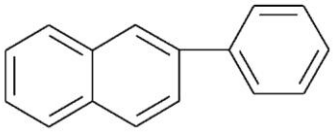
zespół pierścieni



układ pierścieni skondensowanych

Zespoły pierścieni złożone są z identycznych układów cyklicznych (pierścieni lub układów pierścieni); zespołów nie identycznych układów cyklicznych (pierścieni lub układów pierścieni) nie nazywa się zespołami pierścieni z powodu nomenklatury organicznej, na przykład:

trzy identyczne pierścienie (zespół pierścieni)



dwa różne układy pierścieniowe

P-28.2 ZESPOŁY PIERŚCIENI ZŁOŻONE Z DWÓCH IDENTYCZNYCH UKŁADÓW CYKLICZNYCH

P-28.2.1 Zespoły pierścieni połączonych wiązaniem pojedynczym

Zespoły dwóch identycznych układów połączonych wiązaniem pojedynczym nazywa się jedną z dwóch metod:

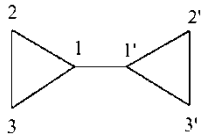
(1) umieszczając przedrostek ‘bi’ (patrz P-14.2.3) przed nazwą odpowiedniego macierzystego wodorku, umieszczoną w razie potrzeby w nawiasie. Nawiasy stosuje się dla uniknięcia pomylenia z nazwami von Baeyera;

(2) umieszczając przedrostek ‘bi’ (patrz P-14.2.3) przed nazwą odpowiedniego podstawnika (nazwy podstawników patrz P-29), umieszczoną w razie potrzeby w nawiasie.

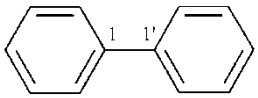
Każdy układ cykliczny numeruje się w tradycyjny sposób, jeden pierścień z nieprimowanymi lokantami, drugi z primowanymi lokantami. Pozycje połączenia powinny otrzymać możliwie najniższe lokanty. Te lokanty muszą być wymieniane w nazwach PIN, w ogólnej nomenklaturze można je pominąć o ile nie spowoduje to niejasności.

Nazwa bifenyl jest zachowana jako 1,1′-bifenyl.

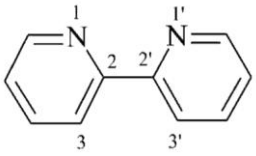
Przykłady:



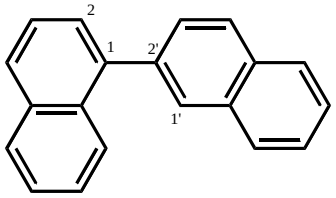
(1) 1,1′-bi(cyklopropan) (PIN)
(2) 1,1′-bi(cyklopropyl)



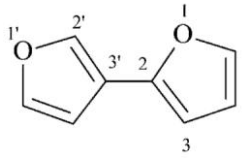
(1) 1,1′-bifenyl (PIN)
bifenyl



(1) 2,2′-bipirydyna (PIN)
(2) 2,2′-bipirydyl



(1) 1,2′-binaftalen (PIN)
(2) 1,2′-binaftyl

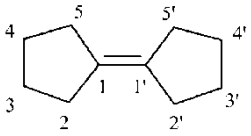


(1) 2,3′-bifuran (PIN)
(2) 2,3′-bifuryl

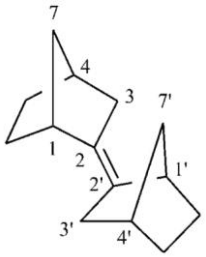
P-28.2.2 Zespoły pierścieni połączonych wiązaniem podwójnym

Kiedy dwa układy cykliczne są połączone wiązaniem podwójnym, to jedyną zalecaną metodą jest metoda (2) opisana w P-28.2.1. Metodę (2) stosuje się również wtedy, kiedy obecność podwójnego wiązania wskazuje się grecką literą Δ i punkt przyłączenia pierścienia jest podany jako indeks górny lokantu. Tej metody nie używa się w tych zaleceniach; dlatego też zespoły trzech lub większej liczby identycznych układów cyklicznych połączonych podwójnymi wiązaniami należy nazywać innymi metodami (patrz P-31).

Przykłady:



1,1′-bi(cyklopentyliden) (PIN)
(nie $\Delta^{1,1'}$-bicyklopentyliden)



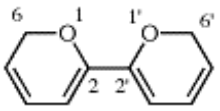
2,2′-bi(bicyklo[2.2.1]heptan-2-yliden (PIN)
(nie $\Delta^{2,2'}$-bicyklo[2.2.1]heptanyliden)

P-28.2.3 Wskazany atom wodoru w komponentach w dwuskładnikowym zespole pierścieni jest nazwany i numerowany zgodnie z P-58.2.1, ignorując wskazane atomy wodoru w pierścieniach lub układach pierścieni składników. Następnie dodaje się maksymalną liczbę nieskumulowanych wiązań podwójnych z uwzględnieniem atomów łączących. Wszystkie pozostałe nasycone pozycje pierścienia określa się jako wskazane atomy wodoru, i umieszcza wraz z odpowiednimi lokantami przed nazwą zespołu.

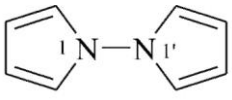
Wymienianie wskazanego atomu wodoru, o ile jest potrzebny, przed nazwą zespołu pierścieni jest zmianą w stosunku do poprzednich zaleceń, kiedy to był wymieniany z nazwą indywidualnego pierścienia, na przykład, 2,2′-bi-2*H*-piran.

Uwaga: Wymienianie wskazanego atomu wodoru przed nazwą zespołu pierścieni jest wyrazem przyjęcia metody stosowanej dla mostkowych skondensowanych układów (patrz P-25.7.1.3.2) i układów spiro pierścieni (patrz P-24.3.2). Ta metoda pozwala by większą liczbę zespołów pierścieni można było traktować jak zespoły pierścieni, na przykład 1*H*,2′*H*-2,4′-biinden. Korzyść z tej metody jest bardziej oczywista przy nazewnictwie pochodnych wymagających biwalencyjnego przyrostka podstawnika, takiego jak keton.

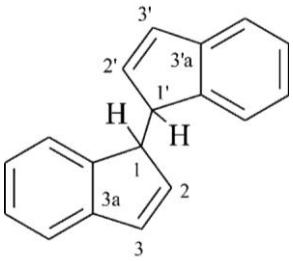
Przykłady:



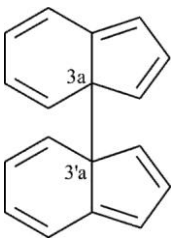
6*H*,6′*H*-2,2′-bipiran
(nie 2,2′-bi-6*H*-piran)



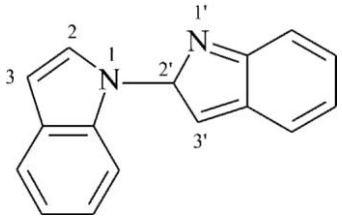
1,1′-bipirol (PIN)
(niepotrzebny wskazany atom wodoru)
(nie 1,1′-bi-1*H*-pirol)



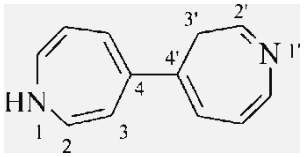
1*H*,1′*H*-1,1′-biinden (PIN)
(nie 1,1′-bi-1*H*-inden)



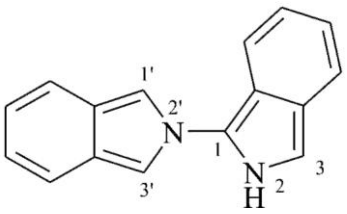
3a,3′a-biinden (PIN)
(niepotrzebny wskazany atom wodoru)
(nie 3a,3′a-bi-3a*H*-inden)



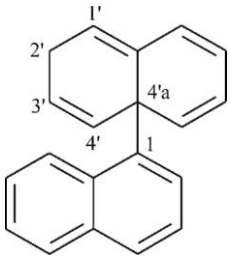
2′*H*-1,2′-biindol (PIN)



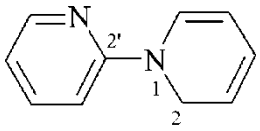
1*H*,3′*H*-4,4′-biazepin (PIN)



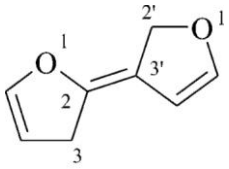
2*H*-1,2′-biizoindol (PIN)



2′*H*-1,4′a-binaftalen (PIN)



2*H*-1,2′-bipirydyna (PIN)



2′*H*,3*H*-2,3′-bifuranyliden (PIN)

P-28.3 NIEROZGAŁĘZIONE ZESPOŁY PIERŚCIENI ZŁOŻONE Z TRZECH DO SZEŚCIU IDENTYCZNYCH UKŁADÓW CYKLICZNYCH

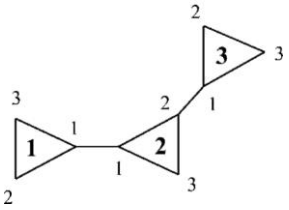
P.28.3.1 Nierozgałęzione zespoły pierścieni zbudowane z trzech lub większej liczby identycznych układów cyklicznych nazywa się umieszczając odpowiedni, bazujący na łacinie, przedrostek liczbowy, ‘ter’, ‘kwater’, ‘kwinkwe’ etc., przed nazwą macierzystego wodorku odpowiadającą powtarzającym się elementom. Wskazany atom wodoru używa sie tak, jak opisano dla dwu-komponentowych zespołów pierścieni (patrz P-28.2.3)

Jako wyjątek, w zespołach pierścieni złożonych z trzech lub większej liczby pierścieni benzenu nazywa się je używając terminu ‘fenyl’. Każdy z cyklicznych układów zespołu numeruje się kolejno i każdy pierścień czy układ pierścieni numeruje się w zwykły dla nich sposób. Złożone lokanty (patrz P-14.3.1) tworzy się wymieniając lokanty określające położenie w każdym pierścieniu lub układzie pierścieni jako indeksy górne do lokantów określających pozycje układu cyklicznego w zespole (odn.25) . Lokanty wskazujące punkty połączenia umieszcza się przed nazwą zestawu w rosnącym porządku, lokanty oznaczające złącza oddziela sie przecinkami, zestawy lokantów złącz oddziela się średnikami.

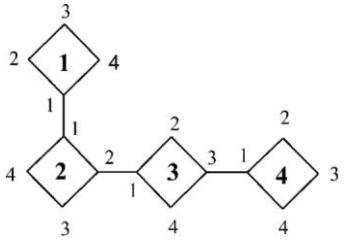
To jest nowy system numerowania zalecany dla zespołów pierścieni zbudowanych z więcej niż dwóch układów pierścieni. Nowy system złożony z podstawowych i złożonych lokantów jak opisano powyżej jest zalecany dla preferowanych nazw IUPAC. Metoda numerowania stosująca seryjnie primowane lokanty, używana w poprzednich zaleceniach (odn. 1 i 2) może być stosowany w nazwach ogólnych.

Uwaga: Eliminacja primowanych lokantów w preferowanych nazwach IUPAC ma na celu poprawienie zrozumienia relacji między strukturą a nazwami. Nowy system numerowania w preferowanych nazwach IUPAC jest podobny do zalecanego w nomenklaturze fanów (patrz P-26.1). Na przykład dwoma alternatywnymi nazwami są 1,1′,2′,1″-tercyklopropan i $1^{1},2^{1},2^{2},3^{1}$-tercyklopropan, w których podstawowe lokanty 1,2 i 3 odpowiadają trzem pierścieniom z zestawu, a lokanty w górnych indeksach należą do punktów połączenia trzech pierścieni.

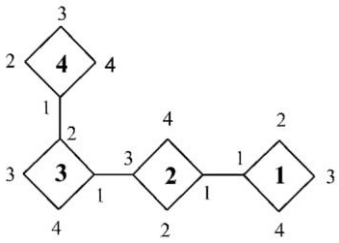
Przykłady:



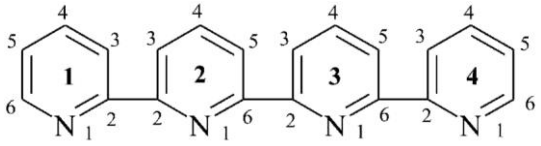
$1^{1},2^{1}:2^{2},3^{1}$-tercyklopropan (PIN)
1,1′:2′,1″-tercyklopropan



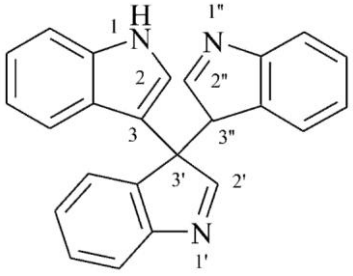
nie



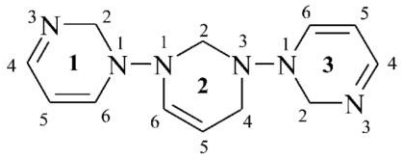
$1^{1},2^{1}:2^{2},3^{1}:3^{3},4^{1}$-kwatercyklobutan (PIN)
(nie $1^{1},2^{1}:2^{3},3^{1}:3^{2}4^{1}$-kwatercyklobutan; zestaw lokantów $1^{1},2^{1}:2^{2},3^{1}:3^{3},4^{1}$ jest niższy od $1^{1},2^{1}:2^{3},3^{1}:3^{2}4^{1}$)
1,1′:2′,1″:3″,1‴-kwatercyklobutan
(nie 1,1′:3′,1″:2′,1‴-kwatercyklobutan (zestaw lokantów 1,1′:2′,1″:3″,1‴ jest niższy od 1,1′:3′,1″:2′,1‴)



$1^{2},2^{2}:2^{6},3^{2}:3^{6},4^{2}$-kwaterpirydyna (PIN)
2,2′:6′,2″:6″,2‴-kwaterpirydyna



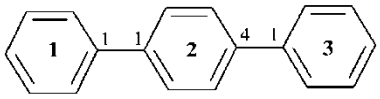
$1^{1}H,3^{3}H$-$1^{3},2^{3}:2^{3},3^{3}$-terindol (PIN)
1*H*,3″*H*-3,3′:3′,3″-terindol



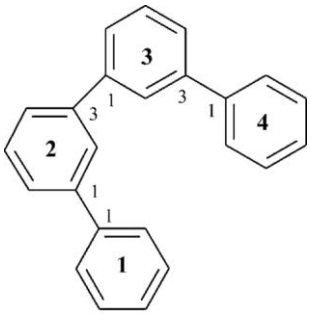
$1^{2}H,2^{2}H,2^{4}H,3^{2}$H-$1^{1},2^{1}:2^{3},3^{1}$-terpirymidyna (PIN)
$2H,2'H,2''H,4'H$-1,1′:3′,1″-terpirymidyna

P-28.3.2 Jako wyjątek od stosowania nazw macierzystych wodorków, zespoły pierścieni liczące od trzech do sześciu pierścieni benzenu nazywa się według metody (2) podanej w P-28.2.1, co daje nazwy takie terfenyl, kwaterfenyl, etc.

Przykłady:



$1^{1},2^{1}:2^{4},3^{1}$-terfenyl (PIN)
1,1′:4′,1″-terfenyl
(nie *p*-terfenyl)

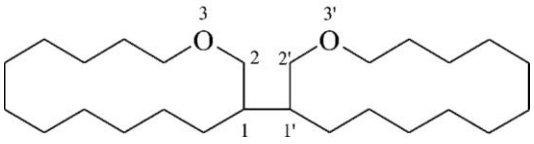


$1^{1},2^{1}:2^{3},3^{1}:3^{3},4^{1}$-kwaterfenyl (PIN)
1,1′:3′,1″:3″,1‴-kwaterfenyl
(nie *m*-kwaterfenyl)

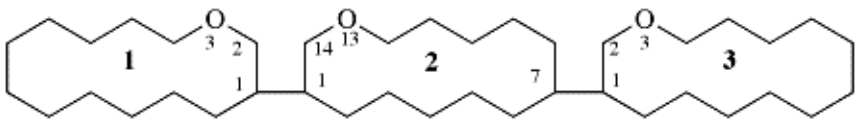
P-28.4 ZESPOŁY PIERŚCIENI ZŁOŻONE Z IDENTYCZNYCH UKŁADÓW CYKLICZNYCH MODYFIKOWANYCH NOMENKLATURĄ ZAMIENNĄ ‘a’ SZKIELETU

P-28.4.1 Nazwy zespołów złożonych z identycznych związków heterocyklicznych tworzy się z nazw macierzystych wodorków, z wyjątkiem monocyklicznych związków von Baeyera liczących więcej niż 10 atomów i nazywanych według nomenklatury zamiennej ‘a’ szkieletu. W tych przypadkach przedrostki ‘a’ umieszcza się przed nazwą zespołu pierścieni.

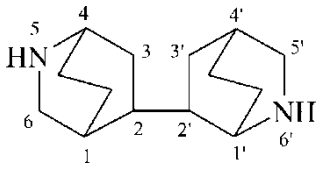
Przykłady:



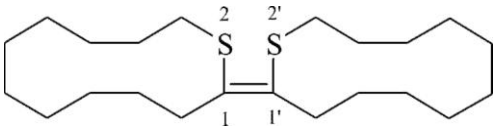
3,3′-dioksa-1,1′-bi(cyklotetradekan) (PIN)



$1^{3},2^{13},3^{3}$-trioksa-$1^{1},2^{1}:2^{7},3^{1}$-tercyklotetradekan (PIN)
3,3″,13′-trioksa-1,1′:7′,1″-tercyklotetradekan



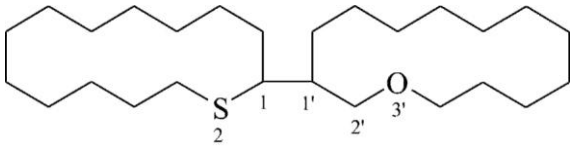
5,6′-diaza-2,2′-bi(bicyklo[2.2.2]oktan) (PIN)



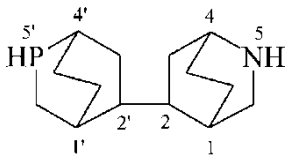
2,2′-ditia-1,1′-bi(cyklododekan-2-yliden) (PIN)

P-28.4.2 Ponieważ węglowodorowe zespoły pierścieni są macierzystymi strukturami dla stosowania nomenklatury zamiennej ‘a’ szkieletu, heteroatomy nie muszą być identyczne ani ulokowane w analogicznych miejscach. Kiedy obecne są heteroatomy różnych pierwiastków, do ich wskazania stosuje się normalną nomenklaturę zamienną ‘a’. Niskie lokanty przypisuje się heteroatomom jako zespołowi, a następnie w kolejności: O > S > Se > Te > N > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al > Ga > In > Tl.

Przykłady:



3′-oksa-2-tia-1,1′-bi(cyklotetradekan) (PIN)
[nie 3-oksa-2′-tia-1,1′-bi(cyklotetradekan);
zestaw lokantów 2,3′ jest niższy od 3,2′]



5-aza-5′-fosfa-2,2′-bi(bicyklo[2,2,2]oktan) (PIN)
[nie 5′-aza-5-fosfa-2,2′-bi(bicyklo[2,2,2]oktan);
lokant ‘5' jest niższy od '5′’; przedrostek 'aza' ma
pierwszeństwo do otrzymania niższego lokantu]

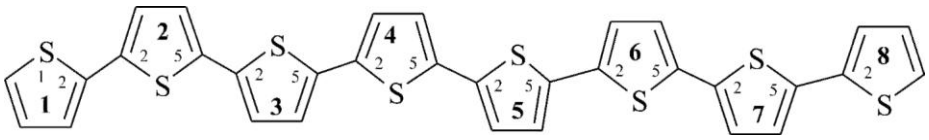
P-28.5 ZESPOŁY PIERŚCIENI UTWORZONE Z WIĘCEJ NIŻ SZEŚCIU IDENTYCZNYCH UKŁADÓW CYKLICZNYCH

Dla zespołów liczących więcej niż sześć identycznych układów cyklicznych preferowane nazwy IUPAC tworzy się stosując zasady nomenklatury fanów (patrz P-26). W ogólnej

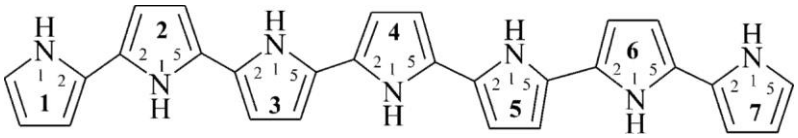
nomenklaturze można stosować w razie potrzeby, każdą z metod dyskutowanych powyżej (patrz P-28.2.1, P-28.3.1, P-28.3.2).

Przykłady:

1,7(1),2,3,4,5,6(1,4)-heptabenzenaheptafan (PIN)
$1^{1},2^{1}:2^{4},3^{1}:3^{4},4^{1}:4^{4},5^{1}:5^{4},6^{1}:6^{4},7^{1}$-septifenyl
1,1′:4′,1″:4″,1‴:4‴,1⁗:4⁗,1⁗′:4⁗′,1⁗″:4⁗″-septifenyl



1,8(2)2,3,4,5,6,7(2,5)heptatiofenaoktafan (PIN)
$1^{2},2^{2}:2^{5},3^{2}:3^{5},4^{2}:4^{5},5^{2}:5^{5},6^{2}:6^{5},7^{2}:7^{5},8^{2}$-oktitiofen
2,2′:5′,2″:5″,2‴:5‴,2⁗:5⁗,2⁗′:5⁗′,2⁗″:5⁗″,2⁗‴:5⁗‴-oktitiofen

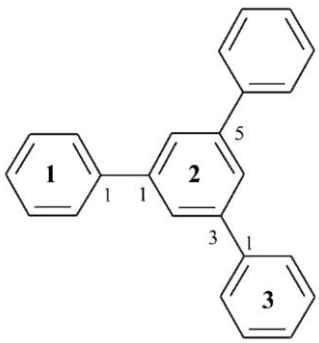


1′*H*,2′*H*,3′*H*,4′*H*,5′*H*,6′*H*,7′*H*-1,7(2),2,3,4,,5,6(2,5)heptapirolaheptafan (PIN)
1′*H*,2′*H*,3′*H*,4′*H*,5′*H*,6′*H*,7′*H*-$1^{2},2^{2}:2^{5},3^{2}:3^{5},4^{2}:4^{5},5^{2}:5^{5},6^{2}:6^{5},7^{2}$-septipirol
1*H*,1′*H*,1″*H*,1‴*H*,1⁗*H*,1⁗′*H*,1⁗″*H*,1⁗‴*H*-2,2′:5′,2″:5″,2‴:5‴,2⁗:5⁗,2⁗′:5⁗′,2⁗″:5⁗″,2⁗‴:5⁗‴-septipirol

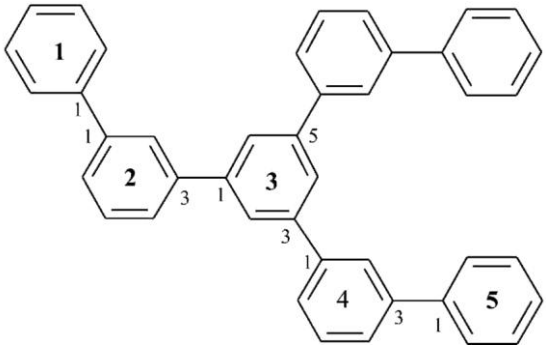
P-28.6 ROZGAŁĘZIONE ZESPOŁY PIERŚCIENI IDENTYCZNYCH UKŁADÓW CYKLICZNYCH

Preferowane nazwy IUPAC tworzy się dodając podstawnik do nazwy najdłuższego nierozgałęzionego zespołu. Nazwy podstawników tworzy się zgodnie z regułami opisanymi w P-29.3.5. W razie potrzeby należy stosować kryteria wyboru głównego łańcucha – najdłuższy łańcuch, maksymalna liczba podstawników, najniższe lokanty dla podstawników rozpatrywanych łącznie, porządek alfanumeryczny.

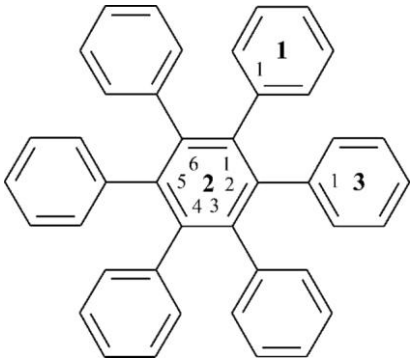
Przykłady:



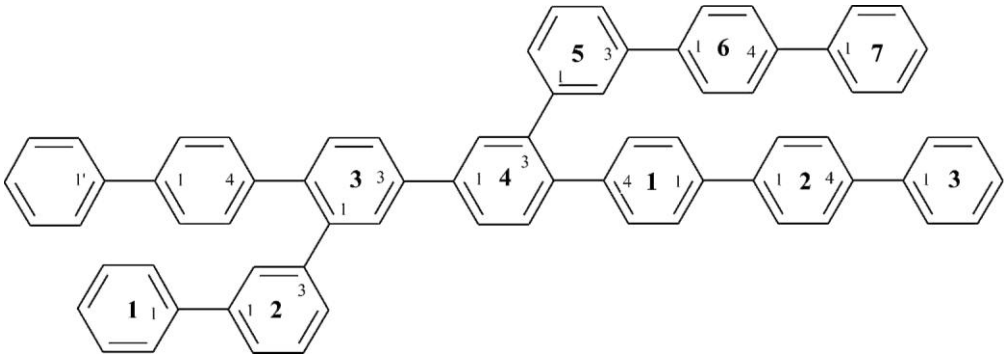
2^{5}-fenylo-$1^{1},2^{1}:2^{3},3^{1}$-terfenyl (PIN)
5′-fenylo-1,1′:3′,1″-terfenyl



3^5-([1,1′-bifenyl]-3-yl)-1^1,2^1:2^3,3^1:3^3,4^1:4^3,5^1-kwinkwefenyl (PIN)
5″-([1,1′-bifenyl]-3-yl)-1,1′:3′,1″:3″,1‴:3‴,1⁗-kwinkwefenyl



2^3,2^4,2^5,2^6-tetrafenylo-1^1,2^1:2^2,3^1-terfenyl (PIN)
(nie 2^2,2^3,2^5,2^6-tetrafenylo-1^1,2^1:2^4,3^1-terfenyl ani 2^3,2^4,2^5,2^6-tetrafenylo-1^1,2^1:2^3,3^1-terfenyl; zestaw lokantów 1^1,2^1:2^2,3^1 jest niższy zarówno od 1^1,2^1:2^4,3^1 jak i od 1^1,2^1:2^3,3^1)
3′,4′,5′,6′-tetrafenylo-1,1′:2′,1″-terfenyl
(nie 2′,3′,5′,6′-tetrafenylo-1,1′:4′,1″-terfenyl ani 2′,4′,5′,6′-tetrafenylo-1,1′:3′,1″-terfenyl; zestaw lokantów 1,1′:2′,1″ jest niższy zarówno od 1,1′:4′,1″ jak i od 1,1′:3′,1″)



3^6-([1,1′-bifenyl]-4-ylo)-4^4-([1^1,2^1:2^4,3^1]-terfenyl]-1^4-ylo)-1,7(1)2,3,4,5(1,3),6(1,4)heptabenzenaheptafan (PIN)
[nie 3^2-([1,1′-bifenyl]-3-ylo)-4^3-([1^1,2^1:2^4,3^1]-terfenyl]-1^3-ylo)-1,7(1)2,3,4,5,6(1,4)heptabenzenaheptafan; zestaw lokantów przyłączenia

‘(1,3)(1,3)(1,3)(1,3)’ dla lokantów superatomów jest niższy od ‘(1,4)(1,4)(1,4)(1,4)’]

P-28.7 ZESPOŁY PIERŚCIENI NIE IDENTYCZNYCH UKŁADÓW CYKLICZNYCH

Zespoły układów cyklicznych, których nie można traktować jako zespołów pierścieni tak jak opisano powyżej (P-28.2 i P-28.3), są po prostu zespołami nie identycznych układów cyklicznych i nazywa sie je stosując nomenklaturę podstawnikową. Takie zespoły cyklicznych węglowodorów omawia rozdział P-61.2.2 a zespoły nie identycznych układów cyklicznych zawierających heteroatomy takie jak Si, N i B przedstawia rozdział P-68. Do nazywania zespołów pierścieni złożonych z identycznych lub nie identycznych układów cyklicznych można stosować nomenklaturę fanów (patrz P-26).

Nazwy zespołów pierścieni identycznych układów cyklicznych częściowo nienasyconych lub częściowo nasyconych można modyfikować albo koncówkami ‘en’ i ‘yn’ (wprowadzenie wiązan wielokrotnych w układzie nasyconym) albo przedrostkami ‘hydro/dehydro’ w układach mancude (P-31). Czasami zespoły nie identycznych układów są wynikiem takich operacji, szczególnie w przypadku zespołów pierścieni benzenowych.

P-29. PRZEDROSTKI WSKAZUJĄCE PODSTAWNIKI WYWODZĄCE SIĘ Z MACIERZYSTYCH WODORKÓW

P-29.0 Wprowadzenie
P-29.1 Definicje
P-29.2 Ogólna metodologia nazywania podstawników
P-29.3 Nazwy systematyczne prostych podstawników wywodzących się z nasyconych macierzystych wodorków
P-29.4 Zespolone podstawniki
P-29.5 Kompleksowe podstawniki
P-29.6 Zachowane nazwy przedrostków określających proste podstawniki wywodzące się z macierzystych wodorków opisanych w rozdziale P-2

P-29.0 WPROWADZENIE

Podrozdział ten podaje nazwy podstawników wywodzących się z macierzystych wodorków, opisanych w podrozdziałach od P-21 do P-28 i stosowanych jako przedrostki w nomenklaturze podstawnikowej. Opisuje też szczegółowo metodologię tworzenia systematycznych przedrostków; identyfikuje się preferowane nazwy IUPAC a także wstępnie wybrane przedrostki.

P-29.1 DEFINICJE

W nomenklaturze związków organicznych podstawniki wywodzące się z macierzystych wodorków są stosowane w wielu aspektach i można je podzielić na proste podstawniki, zespolone podstawniki kompleksowe podstawniki.

Definicje podstawników wywodzących sie z macierzystych wodorków podane poniżej różnią się od poprzednio zalecanych (patrz A-2.3 w odn. 1 i R-4.1 w odn, 2)

P-29.1.1 Prosty podstawnik jest atomem lub grupą atomów uważanych za jednostkę z jedną lub dwoma wolnymi walencyjnościami. Metodologia nazywania takich grup jest opisana w P-29.2. Podstawowe przedrostki zwielokrotniające ‘di’, ‘tri’ ‘tetra’ etc. wskazują obecność więcej niż jednego identycznego prostego podstawnika w złożonym lub kompleksowym podstawniku, ale patrz także P-29.1.2 i P-29.1.3 gdzie opisano użycie przedrostków zwielokrotniających takich jak ‘bis’, ‘tris’, ‘tetrakis’.

P-29.1.2 Zespolony podstawnik składa się z prostych podstawników (macierzystych podstawników) do których dołączony jest jeden lub więcej prostych podstawników. Nazwy zespolonych podstawników tworzy się łącząc nazwy dwóch lub większej liczby prostych podstawników. Robi się to na trzy sposoby:

(1) operacja podstawienia
(2) operacja łączenia
(3) połączenie operacji podstawienia i operacji łączenia

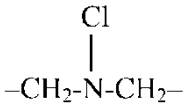
Zespolone podstawniki tworzy się częściej w wyniku operacji podstawienia a nie łączenia, chyba że prosty macierzysty podstawnik nie nadaje sie do podstawienia, czyli nie ma podstawialnych atomów wodoru. Zespolone podstawniki utworzone przez podstawienie wymienia się w nazwie jako przedrostki, często nazywane ‘przedrostkami podstawników’. Zespolone podstawniki utworzone w wyniku łączenia wymienia sie w nazwie jako przedrostki, często nazywane ‘powiązanymi przedrostkami’. Przedrostki zwielokrotniające ‘bis’, ‘tris’, ‘tetrakis’ etc. stosuje się do zwielokrotnienia zespolonych podstawników i w celu uniknięcia niejasności, gdy podstawowe przedrostki zwielokrotniające są już częścią nazwy podstawnika (patrz P-16.3).

Przykłady:

$-CH_2-Cl$	$-CO-Cl$
chlorometyl (preferowany przedrostek) (przedrostek podstawnikowy; patrz P-13.1)	chlorokarbonyl (preferowany przedrostek) (powiązany przedrostek; patrz P-13.3.4)

Mieszane powiązane podstawniki tworzy się przez podstawienie mające na celu wprowadzenie podstawników do jednego lub więcej z ich komponentów.

Przykład:

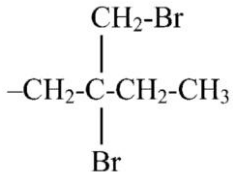


(chloroazanodiylo)bis(metyleno) (preferowany przedrostek)

P-29.1.3 Kompleksowy podstawnik składa się z macierzystego podstawnika, do którego dołączony jest, przez podstawienie lub powiązanie, co najmniej jeden zespolony podstawnik. W kompleksowym podstawniku macierzysty podstawnik składnika zespolonego podstawnika nazywa się pomocniczym macierzystym podstawnikiem. Zwielokrotniające przedrostki, używane jako centralna część nazwy w nomenklaturze multiplikatywnej (patrz P-15.3.2.3), tworzy się w operacji addycji a jeśli składają się z trzech lub więcej części są uznawane za ‘kompleksowe powiązane przedrostki’. Wyprowadzone zwielokrotniające przedrostki ‘bis’, ‘tris’, ‘tetrakis’, etc. używa się do

zwielokrotnienia kompleksowych przedrostków i aby uniknąć niejednoznaczności kiedy podstawowe zwielokrotniające przedrostki są już częścią nazwy podstawnika (patrz P-16.3).

Przykłady:



2-bromo-2-(bromometylo)butyl
(preferowany przedrostek;
kompleksowy podstawiony
przedrostek)

>N-CH_2-O-CH_2-N<

oksybis(metylenonitrylo)
(preferowany przedrostek;
kompleksowy powiązany przedrostek)

Powiązanie i podstawienie można połączyć tworząc podstawiony powiązany kompleksowy przedrostek.

Przykład:

−CHCl-O-CH_2-CH_2-O-CHCl−

etano-1,2-diylobis[oksy(chlorometyleno)] (preferowany przedrostek)

P-29.2 OGÓLNA METODOLOGIA NAZYWANIA PRZEDROSTKÓW PODSTAWNIKÓW

Obecność wolnej walencyjności formalnie utworzonej w wyniku utraty przez macierzysty wodorek jednego lub większej liczby atomów wodoru oznacza się przyrostkami ‘yl’, ‘yliden’ i ‘ylidyn’ łącznie z przedrostkami zwielokrotniającymi określającego liczbę wolnych walencyjności; najniższe lokanty przypisuje się wszystkim wolnym walencyjnościom jako zestawowi, a następnie w kolejności ‘yl’, ‘yliden’, ‘ylidyn’. W nazwach, przyrostki wymienia sie w kolejności ‘yl’, ‘yliden’, ‘ylidyn’. Przyrostki ‘yliden’, ‘ylidyn’ stosuje się wyłącznie do wskazania przyłączenia podstawnika wiązaniem podwójnym czy potrójnym do macierzystego wodorku czy macierzystego podstawnika.

Monowalencyjny	Diwalencyjny	Triwalencyjny	Tetrawalencyjny, etc.
-yl	-diyl -yliden	-triyl -ylidyn -ylyliden	-tetrayl, etc. -ylylidyn, etc. -diyliden, etc. -diylyliden, etc.

Nazwy systematyczne z użyciem przyrostków ‘yl’, ‘yliden’ i ‘ylidyn’ tworzy się dwoma metodami:

(1) Przyrostki ‘yl’, ‘yliden’ i ‘ylidyn’ zastępują końcówkę ‘an’ w nazwie macierzystego wodorku. Atom z wolną walencyjnością kończy łańcuch i zawsze ma lokant ‘1’, który pomija sie w nazwie. Tą metodę zaleca się przede wszystkim dla nasyconych acyklicznych i monocyklicznych podstawników węglowodorowych i dla mononuklearnych wodorków krzemu, germanu, cyny i ołowiu. Podstawniki nazwane ta metodą są określane jako ‘podstawniki typu alkilu’;

(2) Przyrostki ‘yl’, ‘yliden’ i ‘ylidyn’ dodaje się do nazwy macierzystego wodorku. Lokanty dla atomów z wolna walencyjnością są możliwie niskie, na tyle na ile pozwala ustalone numerowanie macierzystego wodorku i z wyjątkiem mononuklearnych macierzystych wodorków i przyrostka ‘yliden’, lokant ‘1’ musi być zawsze wymieniany. Tą metodę stosuje się do tworzenia nazw ‘podstawników w typie alkanyli’, które są prostymi podstawnikami z wolnymi walencyjnościami w pozycji innej niż ‘1’.

Metody (1) nie stosuje sie już do przedrostków boru.

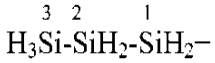
Zastosowanie tych metod w tworzenie preferowanych nazw IUPAC patrz P-57.1.1.1.

Przykłady:

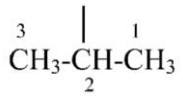
CH_3- metyl (preferowany przedrostek)
metanyl

SiH_3- silil (preferowany przedrostek)

$CH_2=$ metyliden (preferowany przedrostek)
metanyliden

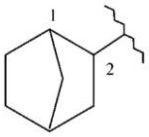


trisilan-1-yl (preferowany przedrostek)

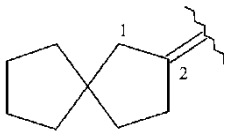


propan-2-yl (preferowany przedrostek)
1-metyloetyl

$C_6H_{11}-$ cykloheksyl (preferowany przedrostek)



bicyklo[2.2.1]heptan-2-yl (preferowany przedrostek)
bicyklo[2.2.1]heptyl



spiro[4.4]nonan-2-yliden (preferowany przedrostek)
spiro[4.4]non-2-yliden

P-29.3 SYSTEMATYCZNE PRZEDROSTKI DLA PROSTYCH PODSTAWNIKÓW WYWODZĄCYCH SIĘ Z NASYCONYCH WODORKÓW MACIERZYSTYCH

P-29.3.1 Przedrostki podstawników wywodzących się z mononuklearnych wodorków macierzystych

P-29.3.2 Przedrostki podstawników wywodzących się z acyklicznych wodorków macierzystych

P-29.3.3 Przedrostki podstawników wywodzących się z nasyconych cyklicznych wodorków macierzystych

P-29.3.4 Przedrostki podstawników wywodzących się z macierzystych wodorków mancude
P-29.3.5 Przedrostki podstawników wywodzących się z zespołów pierścieni
P-29.3.6 Przedrostki podstawników wywodzących się z układów fanowych

P-29.3.1 Przedrostki podstawników wywodzących się z acyklicznych macierzystych wodorków

Proste podstawniki wywodzące się z mononuklearnych macierzystych wodorków węgla, krzemu, germanu, cyny i ołowiu (już nie uwzględnia się boru) nazywa się według metody (1) z P-29.2. Inne mononuklearne macierzyste wodorki , to jest pochodzące od O, F, Cl, Br, I, D, Se, Te, N, As, Sb, Bi, B, Al, Ga, In i Ta nazywa sie według metody (2) z P-29.2. Przedrostek ‘amino’ jest zachowany jako wstępnie wybrany przedrostek dla $–NH_2$, a przedrostki fosfino, arsyno i stybino mogą być używane w ogólnej nomenklaturze. Przedrostki utworzone dla mononuklearnych macierzystych wodorków modyfikowanych konwencją λ są dyskutowane w P-68.3.2 dla pierwiastków grupy 15, w P-68.4.3 dla pierwiastków grupy 16 i w P-68.5.1 dla pierwiastków grupy 17.

Przedrostki dla podstawników z wodorków boru tworzy się wyłącznie według metody (2) z P-29.2, na przykład ‘boranyl’, ‘boranyliden’ i ‘boranylidyn’.

Przykłady:

$CH_3–$
metyl (preferowany przedrostek)
metanyl [patrz P-29.2(2)]

$GeH_3–$
germyl (wstępnie wybrany przedrostek)

$BH_2–$
boranyl (wstępnie wybrany przedrostek) (nie boryl)

$CH_2=$
metyliden (preferowany przedrostek)
metanyliden [patrz P-29.2(2)]

$SnH_2=$
stannyliden (wstępnie wybrany przedrostek)

$BH=$
boranyliden(wstępnie wybrany przedrostek) (nie boryliden)

$HS–$
sulfanyl (wstępnie wybrany przedrostek)
(już nie merkapto)

$H_2P–$
fosfanyl (wstępnie wybrany przedrostek)
fosfino

$HAs=$
arsanyliden (wstępnie wybrany przedrostek)
(nie arsynidyna)

$H_2Al–$
alumanyl (wstępnie wybrany przedrostek)

$HAl=$
alumanyliden (wstępnie wybrany przedrostek)

$S=$
sulfanyliden ((wstępnie wybrany przedrostek)
tiokso

$HSi\equiv$
sililidyn (wstępnie wybrany przedrostek)

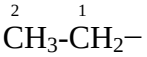
$P\equiv$
fosfanylidyn (wstępnie wybrany przedrostek)
(nie fosfinidyn)

P-29.3.2 Przedrostki podstawników wywodzących się z acyklicznych wodorków macierzystych

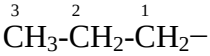
Nazwy prostych przedrostków wyprowadzonych z nazw acyklicznych macierzystych wodorków tworzy się obydwoma metodami z P-29.2.

P-29.3.2.1 Nazwy prostych podstawników pochodzących od acyklicznych węglowodorów z wolnymi wiązalnościami na końcu najdłuższego łańcucha tradycyjnie tworzy sie według metody (1) z P-29.2. Nazywa sie je rodzajowo podstawnikami ‘alkilowymi’, ‘alkilidenowymi’ i ‘alkilidynowymi’. Wolne walencyjności otrzymują lokant ‘1’ który pomija sie w nazwie.

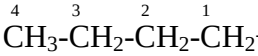
Przykłady:



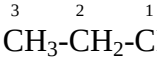
etyl (preferowany przedrostek)



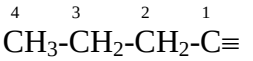
propyl (preferowany przedrostek)



butyl (preferowany przedrostek)



propyliden (preferowany przedrostek)

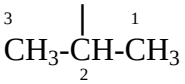


butylidyn (preferowany przedrostek)

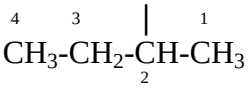
P-29.3.2.2 Nazwy prostych przedrostków innych niż opisane P-29.3.2.1 tworzy się według metody (2) z P-29.2. Podstawniki pochodzące z węglowodorów nazywa sie rodzajowo ‘alkanylami’, ‘alkanylidenami’ i ‘alkanylidynami’. Niskie lokanty przypisuje sie wolnym walencyjnościom jako zestawowi, w zgodzie z numeracją łańcucha. Jeżeli jest wybór, niskie lokanty przypisuje się w kolejności ‘yl’, ‘yliden’ i ‘ylidyn’. W nazwach przyrostki wymienia się w kolejności ‘yl’, ‘yliden’ i ‘ylidyn’.

Przykłady:

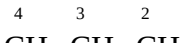
propan-1-yl
propyl (preferowany przedrostek)



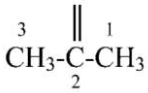
propan-2-yl (preferowany przedrostek)
(nie prop-2-yl)



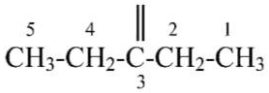
butan-2-yl (preferowany przedrostek)
(nie but-2-yl)



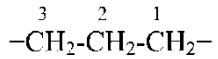
butanylidyn
butylidyn (preferowany przedrostek)



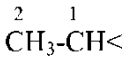
propan-2-yliden (preferowany przedrostek)



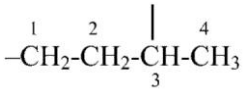
pentan-3-yliden (preferowany przedrostek)



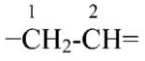
propano-1,3-diyl (preferowany przedrostek)
(nie trimetylen)

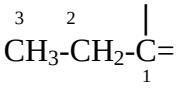


etano-1,1-diyl (preferowany przedrostek)
(nie etyliden)



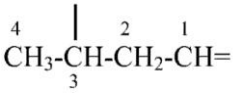
butano-1,3-diyl (preferowany przedrostek)
1-metylopropano-1,3-diyl

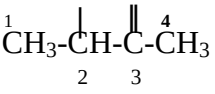




etan-1-yl-2-yliden (preferowany przedrostek)

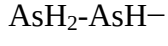
propan-1-yl-1-yliden (preferowany przedrostek)

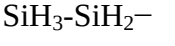




butan-3-yl-1-yliden (preferowany przedrostek)

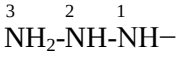
butan-2-yl-3-yliden (preferowany przedrostek)

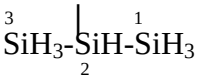




diarsanyl (wstępnie wybrany przedrostek)

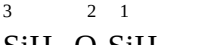
disilanyl (wstępnie wybrany przedrostek)

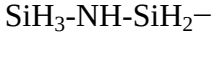




triazan-1-yl (wstępnie wybrany przedrostek)

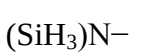
trisilan-2-yl (wstępnie wybrany przedrostek)





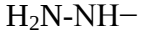
disiloksanyl (wstępnie wybrany przedrostek)

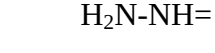
(sililoamino)silyl (wstępnie wybrany przedrostek)
(nie disilazan-1-yl; disilazan nie jest już rekomendowanym macierzystym wodorkiem, patrz P-21.2.3.1)



disililoamino (wstępnie wybrany przedrostek)
(nie disilazan-2-yl; disilazan nie jest już rekomendowanym macierzystym wodorkiem, patrz P-21.2.3.1)

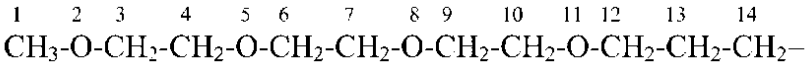
bis(sililoamino)silil (wstępnie wybrany przedrostek)
(nie trisilazan-3-yl; trisilazan nie już rekomendowanym macierzystym wodorkiem, patrz P-21.2.3.1)





hydrazynyl (wstępnie wybrany przedrostek)

hydrazynyliden (wstępnie wybrany przedrostek)

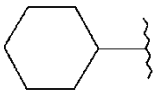


2,5,8,11-tetraoksatetradekan-1-yl (PIN)

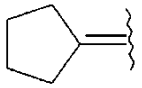
P-29.3.3 Przedrostki podstawników pochodzących od nasyconych cyklicznych wodorków macierzystych

Nazwy monowalencyjnych podstawników pochodzących od alkanów tworzy się tradycyjnie według metody (1) z P-29.2. Nazwy wszystkich innych podstawników wywodzących się od nasyconych cyklicznych macierzystych wodorków tworzy sie według metody (2) z P-29.2. Niskie lokanty przypisuje się wolnym walencyjnościom ‘yl’, ‘yliden’ i ‘ylidyn’ w zgodzie z numeracją macierzystego wodorku. Jeżeli istnieje wybór, przyrostkom przypisuje się niskie lokanty zgodnie z tym porządkiem. Przyrostki wymienia się w kolejności ‘yl’, ‘yliden’, ‘ylidyn’. Preferowane nazwy opisano w P-57.1.5.1.

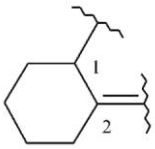
Przykłady:



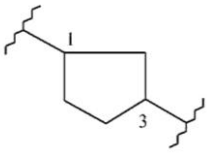
cykloheksyl (preferowany przedrostek)
cykloheksanyl



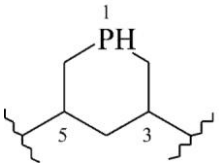
cyklopentyliden (preferowany przedrostek)
cyklopentanoyliden



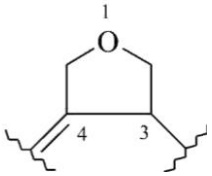
cykloheksyl-1-yl-2-yliden
(preferowany przedrostek)



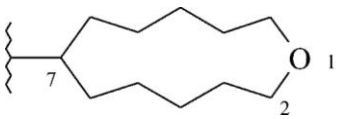
cyklopentano-1,3-diyl
(preferowany przedrostek)



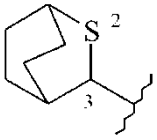
fosfinano-3,5-diyl
(preferowany przedrostek)



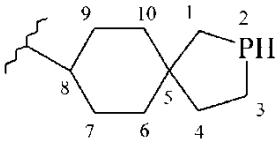
oksolan-3-yl-4-yliden
(preferowany przedrostek)



1-oksacyklododekan-7-yl (preferowany przedrostek)



2-tiabicyklo[2.2.2]oktan-3-yl
(preferowany przedrostek)

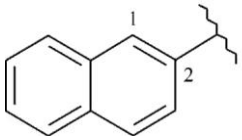


2-fosfaspiro[4.5]dekan-8-yl
(preferowany przedrostek)

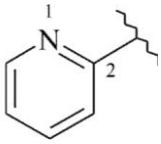
P-29.3.4 Przedrostki podstawników wywodzących się z macierzystych wodorków mancude

P-29.3.4.1 Wszystkie pierścienie mancude i układy pierścieni nazywa się według metody (2) z P-29.2. Kiedy jest jeden atom wodoru, nie ma problemu z utworzeniem monowalencyjnego podstawnika. Kiedy nie ma atomów wodoru lub kiedy potrzebny jest podstawnik typu ‘yliden’, konieczne staje się użycie ‘dodanego wskazanego atomu wodoru’ (patrz P-14.7). Formalnie, ta metoda polega na dodaniu jednego atomu wodoru do atomu, z którego wyprowadzony jest podstawnik i innego atomu wodoru, który może być ulokowany na dowolnym atomie pierścienia lub układu pierścieni. Ten ‘dodany wskazany atom wodoru’ wskazuje sie symbolem *H*, poprzedzonym lokantem wskazującym jego pozycję.

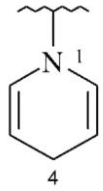
Przykłady:



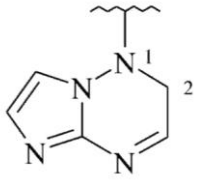
naftalen-2-yl (preferowany przedrostek)



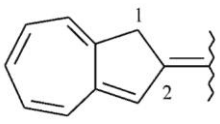
pirydyn-2-yl (preferowany przedrostek)



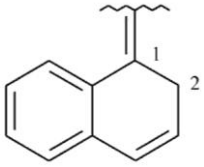
pirydyn-1(4*H*)-yl
(preferowany przedrostek)



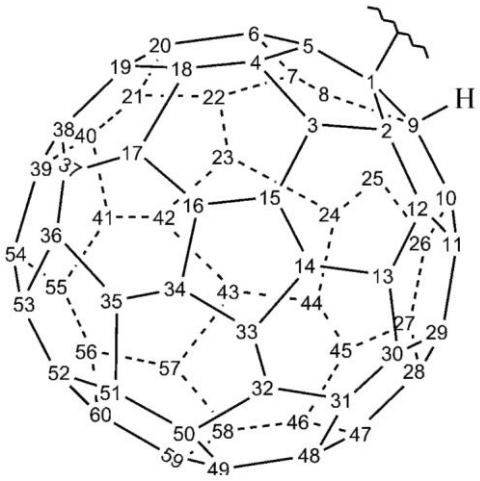
imidazo[1,2-*b*]triazyn-1(2*H*)-yl
(preferowany przedrostek)



azulen-2(1*H*)-yliden
(preferowny przedrostek)



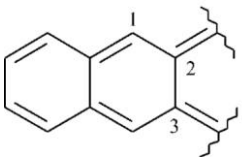
naftalen-1(2*H*)-yliden
(preferowany przedrostek)



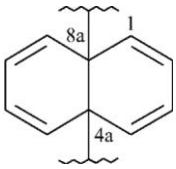
(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren-1(9*H*)-yl (preferowany przedrostek)

P-29.3.4.2 Podstawniki ‘diyliden’, pochodzące ze związków mancude w wyniku przekształceniu dwóch atomów wodoru w wolne walencyjności z koniecznym przegrupowaniem podwójnych wiązań do struktury chinonowej, nazywa się dodając dwa przyrostki ‘yliden’, to znaczy ‘diyliden’ do macierzystego wodorku; nie jest potrzebny dodany atom wodoru. Także nie jest potrzebny dodany atom wodoru w przypadku tworzenia podstawnika ‘diyl’gdy wolne walencyjności są ulokowane na atomach skondensowania.

Przykłady:



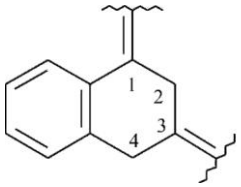
naftaleno-2,3-diyliden
(preferowany przedrostek)



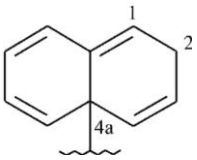
naftaleno-4a,8a-diyl
(preferowany przedrostek)

Jeżeli w wyniku wprowadzenia wolnych walencyjności nie powstaje chinonowa struktura, w nazwie muszą być wymienione dodane atomy wodoru; otrzymują one najniższe lokanty. Również, jeżeli przy atomie skondensowania występuje jedna wolna walencyjność typu ‘yl’, w nazwach musi być wymieniony dodany atom wodoru.

Przykłady:



naftaleno-1,3(2*H*,4*H*)-diyliden
(preferowany przedrostek)



naftaleno-4a(2*H*)-yl
(preferowany przedrostek)

P-29.3.5 Przedrostki podstawników pochodzące z zespołów pierścieni

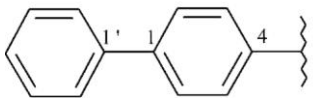
Nazwy zespołów pierścieni składających się z dwóch identycznych pierścieni lub układów pierścieni tworzy się jak opisano w podrozdziale P-28.2, a pochodzące z zespołów pierścieni złożonych z trzech do sześciu identycznych pierścieni lub układów pierścieni są opisane w P-28.3. Zespoły pierścieni zawierające więcej niż sześć pierścieni albo układów pierścieni nazywa się nomenklaturą fanów jak opisano w P-28.5. Niskie lokanty przypisuje się zwornikom pierścieni, a następnie wolnym walencyjnościom.

Nazwy podstawników pochodzących z zespołów pierścieni pisze się na dwa sposoby:

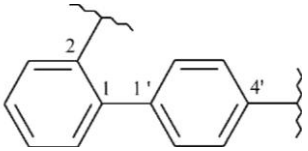
(1) do nazwy bifenyl dodaje się przyrostek ‘yl’;

(2) nazwy oznaczone lokantami umieszcza się w kwadratowych nawiasach; przyrostki ‘yl’ i ‘yliden’ dodaje się do nazwy macierzystego wodorku.

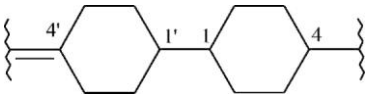
Przykłady:



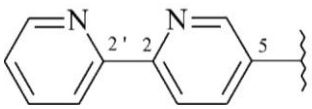
[1,1′-bifenylo]-4-yl
(preferowany przedrostek)



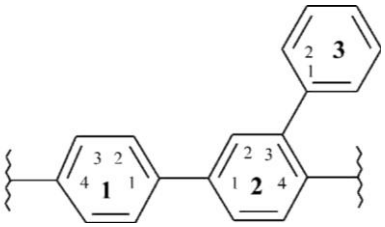
[1,1′-bifenylo]2,4′-diyl
(preferowany przedrostek)



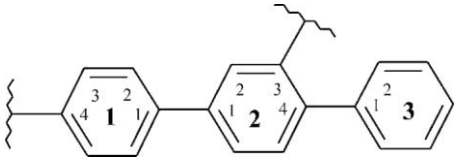
[1,1′-bi(cykloheksano)-4-yl-4′-yliden
(preferowany przedrostek)



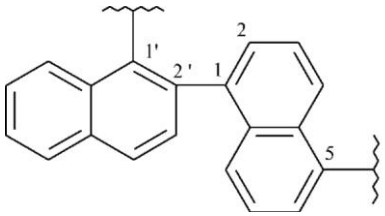
[2,2′-bipirydyn]-5-yl
(preferowany przedrostek)
[2,2′-bipirydyl]-5-yl



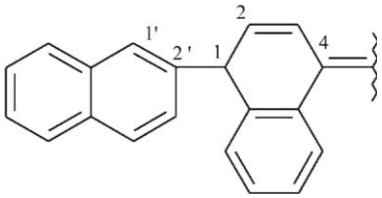
[1^1,2^1,2^3,3^1-terfenylo]-1^4,2^4-diyl
(preferowany przedrostek)
[1,1′:3′,1″-terfenylo]-4,4′-diyl



[^{1},2^1,2^4,3^1-terfenylo]-1^4,2^3-diyl
(preferowany przedrostek)
[1,1′:4′,1″-terfenylo]-3′,4-diyl



[1,2′-binaftaleno]-1′,5-diyl
(preferowany przedrostek)
[1,2′-binaftylo]-1′,5-diyl

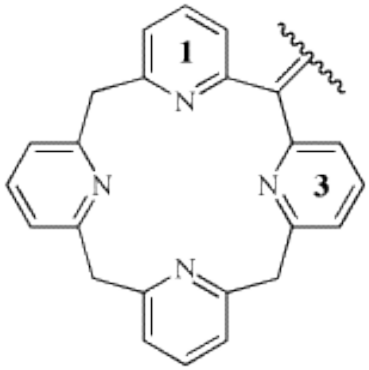


[1,2′-binaftaleno]-4(1*H*)-yliden
(preferowany przedrostek)
[1,2′-binaftylo]-4(1*H*)-yliden

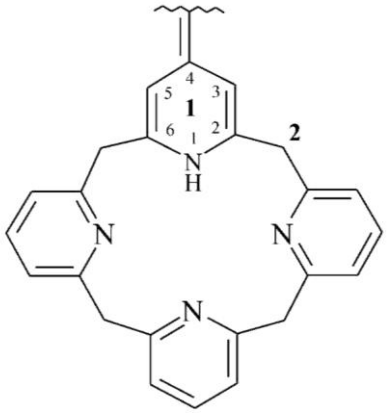
P-29.3.6 Przedrostki podstawników pochodzących z układów fanowych

Nazwy podstawników pochodzące z cyklofanów tworzy się stosując, opisane powyżej, zasady.

Przykłady:



(I)



(II)

(I) 1,3,5,7(2,6)-tetrapirydynacyklooktafan-2-yliden (preferowany przedrostek)
(II) 1,3,5,7(2,6)-tetrapirydynacyklooktafan-$1^4(1^1H)$-yliden (preferowany przedrostek)

P-29.4 PODSTAWNIKI ZESPOLONE

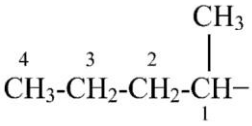
P-29.4.1 Zespolone podstawione podstawniki

Zespolone podstawione podstawniki tworzy się przez podstawienie jednego, lub więcej, prostego podstawnika do innego prostego podstawnika, który został uznany głównym łańcuchem. Wybór głównego łańcucha jest wyczerpująco przedyskutowany w podrozdziale P-44.3. Pierwszym stosowanym kryterium jest wymaganie, aby główny łańcuch był najdłuższym łańcuchem; jego zastosowanie pokazane jest poniżej na przykładach podstawników związków acyklicznych.

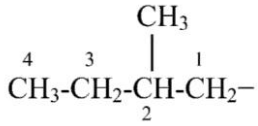
Mono-, di- i poliwalencyjne grupy pochodzące z homogenicznych łańcuchów nazywa się przez dodanie przedrostków określających łańcuchy boczne do nazwy nierozgałęzionego podstawnika mającego możliwie najdłuższy łańcuch. Jeśli istnieje możliwość wyboru, najniższe lokanty przypisuje się bocznemu łańcuchowi. Obecność identycznych prostych podstawników wskazuje się odpowiednimi zwielokrotniającymi przedrostkami ‘di’, ‘tri’, ‘tetra’, etc.

Nazwy podstawników tworzy się zgodnie z P-29.3. Podstawniki zespolonych podstawników muszą być nazwane preferowaną nazwą IUPAC albo wstępnie wybraną nazwą.

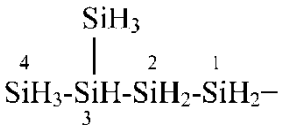
Przykłady:



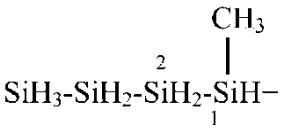
1-metylobutyl
pentan-2-yl (preferowany przedrostek, patrz P-29.2.2)



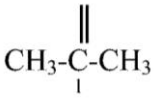
2-metylobutyl (preferowany przedrostek)



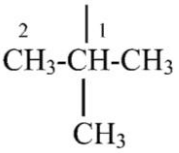
3-sililotetrasilan-1-yl (wstępnie wybrany przedrostek)



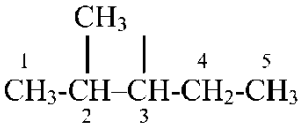
1-metylotetrasilan-1-yl (preferowany przedrostek)



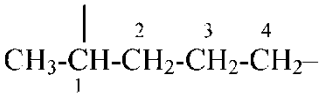
1-metyloetyliden
propan-2-yliden (preferowany przedrostek)



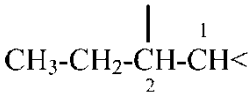
1,1-dimetyloetyl
(pokazano numerację)
2-metylopropan-2-yl
tert-butyl (preferowany przedrostek)



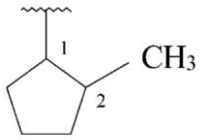
2-metylopentan-3-yl
preferowany przedrostek)
(nie 4-metylopentan-3-yl;
(lokant '2' jest niższy od '4')



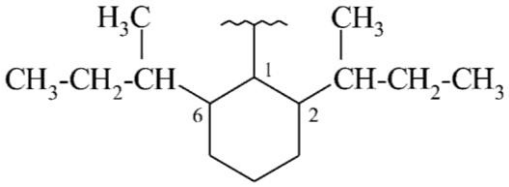
1-metylobutano-1,4-diyl
pentano-1,4-diyl (preferowany przedrostek)



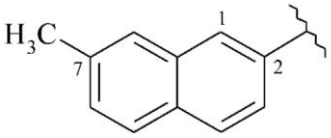
2-etyloetano-1,1,2-triyl
butano-1,1,2-triyl (preferowany przedrostek)



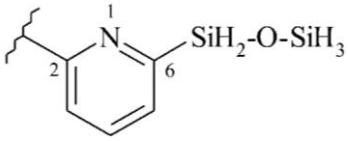
2-metylocyklopentyl
(preferowany przedrostek)



2,6-di(butan-2-yl)cykloheksyl
(preferowany przedrostek)



7-metylonaftalen-2-yl
(preferowany przedrostek)

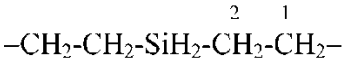


6-disiloksanylopirydyn-2-yl
(preferowany przedrostek)

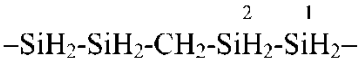
P-29.4.2 Zespolone powiązane podstawniki

Zespolone powiązane podstawniki używane są tylko w nomenklaturze multiplikatywnej (patrz P-15.3). Nazwy tworzy się dodając do siebie di- lub poliwalencyjne podstawniki, konkretnie tak jak zaleca nomenklatura multiplikatywna (patrz P-15.3) dodając nazwy zewnętrznych podstawników do nazwy centralnego podstawnika. Jeśli jest zachowana symetria całego podstawnika to dozwolone jest podstawienie składników.

Przykłady:

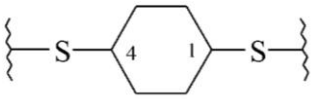


silanodiylodi(etano-2,1-diyl)
(preferowany przedrostek)
silanodiylodietylen

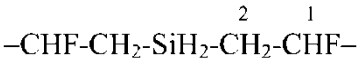


metylenobis(disilano-2,1-diyl)
(preferowany przedrostek)

1,4-fenylenobis(metylen)
(preferowany przedrostek; 1,4-fenylen i metylen są preferowanymi zachowanymi IUPAC przedrostkami, patrz P-29.6.1)



cykloheksano-1,4-diylobis(sulfanodiyl)
(preferowany przedrostek)
cykloheksano-1,4-diylobis(tio)



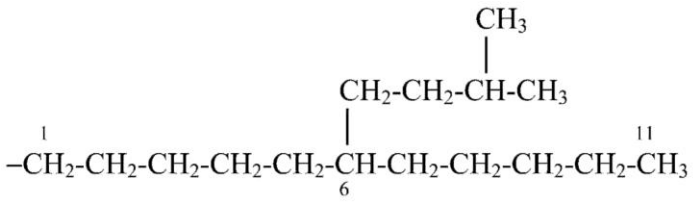
silanodiylobis(1-fluoroetano-2,1-diyl)
(preferowany przedrostek)
silanodiylobis(1-fluoroetylen)

P-29.5 PODSTAWNIKI KOMPLEKSOWE

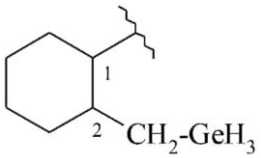
P-29.5.1 Kompleksowe podstawione podstawniki

Kompleksowe podstawione podstawniki tworzy się przez podstawienie acyklicznego zespolonego podstawialnego podstawnika do acyklicznego podstawnika albo cyklicznego podstawnika zgodnie z porządkiem starszeństwa łańcuchów, pierścieni i układów pierścieni (P-44).

Przykłady:



6-(3-metylobutylo)undecyl (preferowany przedrostek)



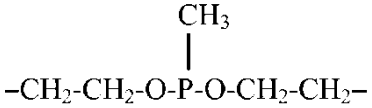
2-(germylometylo)cykloheksyl (preferowany przedrostek)

P-29.5.2 Powiązane kompleksowe podstawniki

Powiązane podstawniki są kompleksowymi podstawnikami jeżli składają się z trzech lub więcej składników. Podstawienie jest dozwolone jeśli zachowana jest symetria całego podstawnika.

Przykłady:

sulfanodiylobis(metylenoksy) (preferowany przedrostek)



(metylofosfanodiylo)bis(oksyetano-2,1-diyl) (preferowany przedrostek)

P-29.6 ZACHOWANE NAZWY PRZEDROSTKÓW PROSTYCH PODSTAWNIKÓW WYWODZĄCYCH SIĘ Z MACIERZYSTYCH WODORKÓW OPISANYCH W ROZDZIALE P-2

W tym podrozdziale dyskutowane są trzy aspekty użycia w nomenklaturze prostych podstawników o zachowanych nazwach, pochodzących z macierzystych wodorków.

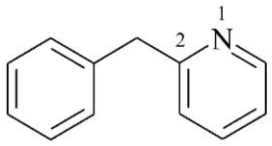
P-29.6.1 Zachowane przedrostki, które są preferowanymi przedrostkami
P-29.6.2 Zachowane przedrostki, które nie są używane jako preferowane przedrostki
P-29.6.3 Zachowane przedrostki, które nie są już zalecane jako zatwierdzone przedrostki

P-29.6.1 Zachowane przedrostki, które są preferowanymi przedrostkami

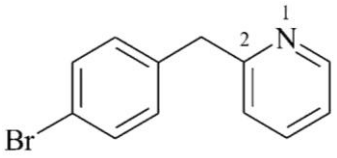
Zwyczajowe przedrostki benzyl, benzyliden, benzylidyn są zachowanymi preferowanymi przedrostkami ale nie mogą być podstawiane. Patrz także P-29.6.2.

W Przewodniku z 1993 roku (odn. 2) nazwy ‘benzyl’,''benzyliden’ i ‘benzylidyn’ mogły być podstawione tylko w pierścieniu. Jednakże w obecnych zaleceniach, dla preferowanych przedrostków, podstawienie jest niedozwolone zarówno w pierścieniu jak i łańcuchu bocznym. W ogólnej nomenklaturze dopuszczalne jest ograniczone podstawienie (patrz P-29.6.2)

Przykłady:



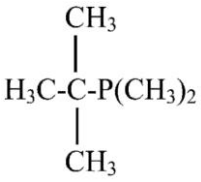
2-benzylopirydyna (PIN)
2-(fenylometylo)pirydyna



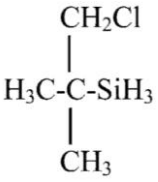
2-(4-bromobenzylo)pirydyna
2-(4-bromofenylometylo)pirydyna (PIN)

Podstawienie w zachowanej nazwie ‘*tert*-butyl’ nigdy nie było zalecane i obecne zalecenia utrzymują tą zasadę. Nigdy nie zostały przyjęte dopuszczalne lokanty dla tej nazwy. Nazwy ‘metanodiyl’ i ‘benzeno-1,2-diyl’ nie są zalecane w miejsce, odpowiednio, ‘metylen’ i ‘1,2-fenylen’'. Nazwy ‘trimetylen’, ‘tetrametylen’, etc. nie są zalecane.

Przykłady:



tert-butylo(dimetylo)fosfan (PIN)
dimetylo(1,1-dimetyloetylo)fosfan

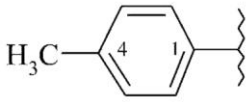


(1-chloro-2-metylopropan-2-ylo)silan (PIN)
(2-chloro-1,1-dimetyloetylo)silan

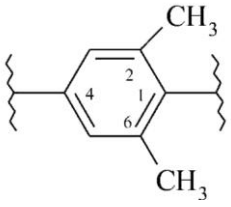
Zachowane przedrostki ‘metylen’, ‘fenyl’ i ‘1,2’, ‘1,3’ i ‘1,4-fenylen’ były używane jako w pełni podstawialne podstawniki; w obecnych zaleceniach ta zasada jest utrzymana tylko dla prostych, zespolonych i kompleksowych podstawników.

Przykłady:

-CHBr- bromometylen (preferowany przedrostek)



4-metylofenyl (preferowany przedrostek)



2,6-dimetylo-1,4-fenylen (preferowany przedrostek)

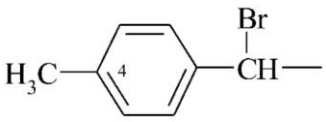
P-29.6.2 Zachowane przedrostki nie będące preferowanymi przedrostkami

P-29.6.2.1 Przedrostki benzyl, benzyliden i benzylidyn są preferowanymi przedrostkami tylko wtedy gdy są niepodstawione. Jednakże mogą być używane w ogólnej nomenklaturze po podstawieniu w następujący sposób:

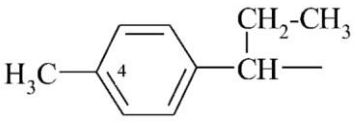
(1) nieograniczone podstawienie w pierścieniu

(2) podstawienie w pozycji α przez charakterystyczne atomy lub grupy, które zawsze wskazuje się jako podstawniki (patrz Tabela 5.1), albo przez podstawniki nie przedłużające łańcucha.

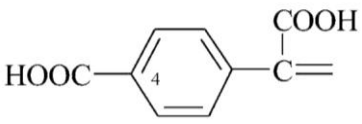
Przykłady:



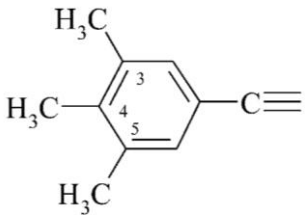
bromo(4-metylofenylo)metyl
(preferowany przedrostek)
α-bromo-4-metylobenzyl



1-(4-metylofenylo)propyl
(preferowany przedrostek)
(nie α-etylo-4-metylobenzyl)



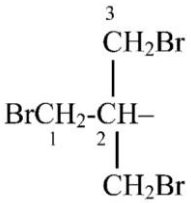
α,4-dikarboksybenzyliden
karboksy(4-karboksyfenylo)metyliden
(preferowany przedrostek)



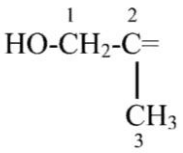
(3,4,5-trimetylofenylo)metylidyn
(preferowany przedrostek)
3,4,5-trimetylobenzylidyn

P-29.6.2.2 W ogólnej nomenklaturze zachowane są przedrostki izopropyl, izopropyliden i trytyl ale niedopuszczalne jest jakiekolwiek podstawienie.

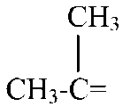
Przykłady:



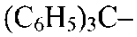
1,3-dibromo-2-(bromometylo)propan-2-yl (preferowany przedrostek)
2-bromo-1,1-bis(bromometylo)etyl



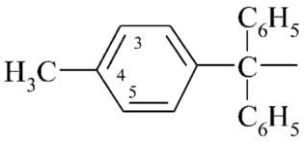
1-hydroksypropan-2-yliden (preferowany przedrostek)
2-hydroksy-1-metyloetyliden



propan-2-yliden (preferowany przedrostek)
1-metyloetyliden
izopropyliden (podstawienie jest niedozwolone)



trytyl (podstawienie jest niedozwolone)
trifenylometyl(preferowany przedrostek)



(4-metylofenylo)difenylometyl (preferowany przedrostek)

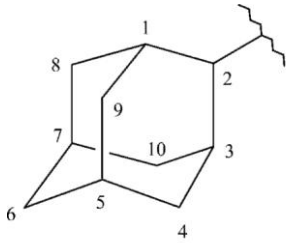
P-29.6.2.3 Zachowane są, ale tylko w ogólnej nomenklaturze, przedrostek etylen i zwyczajowe przedrostki podstawników pierścieniowych; są one w pełni podstawialne.
Przykłady:

-CH_2-CH_2-

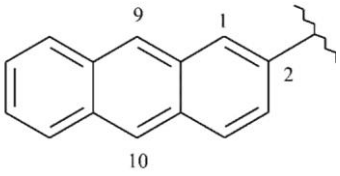
etylen
etano-1,2-diyl (preferowany przedrostek)

-CHCl-CHCl-

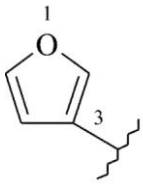
1,2-dichloroetylen
1,2-dichloroetano-1,2-diyl (preferowany przedrostek)



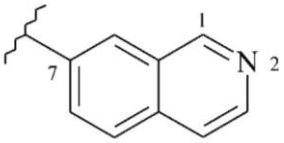
2-adamantyl (również izomer 1-)
adamantan-2-yl (preferowany przedrostek)
tricyklo[3.3.1.$1^{3,7}$]dekan-2-yl



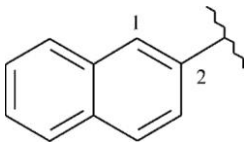
2-antryl (również izomery 1- i 9-)
antracen-2-yl (preferowane przedrostki)



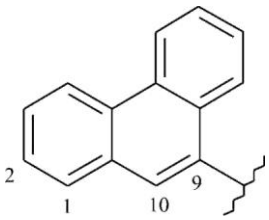
3-furyl (również izomer 2-)
furan-3-yl (również izomer 2-; preferowane przedrostki)



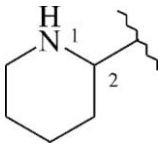
7-izochinolil (również izomery 1-, 3-, 4-,5-, 6 i 8)
izochinolin-7-yl (również izomery 1-, 3-,4-, 5-, 6-, i 8-; preferowane przedrostki)



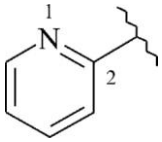
2-naftyl (również izomer 1-)
naftalen-2-yl (również izomer 1-; preferowane przedrostki)



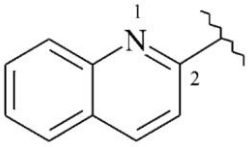
9-fenantryl (również izomery 1-, 2-, 3- i 4-)
fenantren-9-yl (również izomery 1-, 2-, 3- i 4-; preferowane przedrostki)



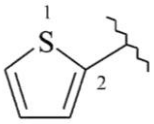
2-piperydyl (również izomery 1-, 3- i 4-)
piperydyn-2-yl (również izomery 1-, 3- i 4-; preferowane przedrostki)
piperydyno = piperydyn-1-yl (tylko)



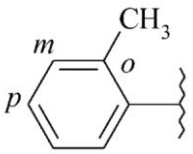
2-pirydyl (również izomery 3- i 4-)
pirydyn-2-yl (również izomery 3- i 4-; preferowane przedrostki)



2-chinolil (również izomery 3-, 4-, 5-, 6-, 7- i 8-)
chinolin-2-yl (również izomery 3-, 4-, 5-, 6-, 7- i 8-; preferowane przedrostki)



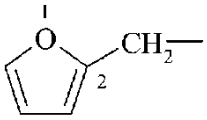
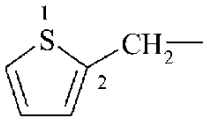
2-tienyl (również izomer 3-)
tiofen-2-yl (również izomer 3-; preferowane przedrostki)



o-tolil (również izomery *m*- i *p*-; podstawienie jest niedozwolone)
2-metylofenyl (również izomery 3- i 4-; preferowane przedrostki)

P-29.6.3 Zachowane przedrostki, które nie są już zalecane jako zatwierdzone przedrostki

Zwyczajowe, pospolite i tradycyjne przedrostki były zawsze nieodłączną częścią nomenklatury organicznej. Jednakże w miarę rozwoju systematycznej nomenklatury i jej szerokiego stosowania wiele z tych przedrostków znalazło się na uboczu. Skutkiem tego każdy kolejny zestaw rekomendacji IUPAC zawiera mniej tych tradycyjnych przedrostków. W tych rekomendacjach postąpiono podobnie. Zalecenia z 1993 roku (odn. 2) zawierały poniżej wymienione przedrostki ale NIE SĄ one zalecane w obecnych zaleceniach. Odpowiadające im systematyczne przedrostki, oparte na obecnych zaleceniach, są podane jako ‘preferowane przedrostki’.

C_6H_5-CH_2-CH_2-	fenetyl 2-fenyloetyl (preferowany przedrostek)
$(C_6H_5)_2CH$-	benzhydryl difenylometyl (preferowany przedrostek)
$(CH_3)_2CH$-CH_2-	izobutyl 2-metylopropyl (preferowany przedrostek)
CH_3-CH_2-$CH(CH_3)$-	*sec*-butyl buran-2-yl (preferowany przedrostek) 1-metylopropyl
$(CH_3)_2CH$-CH_2-CH_2-	izopentyl 3-metylobutyl (preferowany przedrostek)
CH_3-CH_2-$C(CH_3)_2$-	*tert*-pentyl 2-metylobutan-2-yl (preferowany przedrostek) 1,1-dimetylopropyl
$(CH_3)_3C$-CH_2-	neopentyl 2,2-dimetylopropyl (preferowany przedrostek)
	furfuryl (tylko izomer 2-) (furan-2-ylo)metyl (preferowany przedrostek)
	tenyl (tylko izomer 2-) (tiofen-2-ylo)metyl (preferowany przedrostek) 2-tienylometyl

ROZDZIAŁ P-3. GRUPY CHARAKTERYSTYCZNE (FUNKCYJNE) I PODSTAWNIKI

P-30 Wprowadzenie
P-31 Modyfikacja stopnia uwodornienia macierzystego wodorku
P-32 Przedrostki dla podstawników wywodzących się z macierzystych wodorków o zmodyfikowanym stopniu uwodornienia
P-33 Przyrostki
P-34 Związki o macierzystych funkcjach
P-35 Przedrostki dla grup charakterystycznych

P-30 WPROWADZENIE

Przyrostki i/lub przedrostki dołączone do macierzystej nazwy określają konkretną strukturę molekularną i zazwyczaj reprezentują różnego typu **podstawniki**, które uważa się za zastępujące atomy wodoru macierzystego wodorku lub struktury macierzystej. Zwyczajowo takie podstawniki uważa się za **charakterystyczne** (lub **funkcyjne**) kiedy połączenie pomiędzy podstawnikiem a strukturą macierzystą nie jest wiązaniem węgiel-węgiel, na przykład –OH, =O i $–NH_2$, ale istnieją wyjątki, takie jak –COOH i CN. Wydaje się właściwym zachowanie ogólnego obrazu **funkcyjności** jako implikującej obecność heteroatomów, ale nie byłaby pomocną próba precyzyjnego zdefiniowania granic stosowania tego terminu.

IUPAC uważa nienasycenie węgiel-węgiel w związkach acyklicznych i cyklicznych za specjalny typ funkcyjności i dlatego opisywane ono jest tutaj, w rozdziale P-3, a nie w rozdziale P-2 (wodorki macierzyste). Obecność w tym miejscu nienasycenia, podobnie jak uwodornienia macierzystych wodorków o maksymalnej liczbie nieskumulowanych wiązań podwójnych (mancude) jest logiczna dla nomenklatury, ponieważ wskazywane końcówkami nienasycenie acyklicznych i cyklicznych macierzystych wodorków i nasycenie macierzystych wodorków mancude wskazywane przedrostkami hydro/dehydro są w istocie równoważne.

Ten rozdział dotyczy też **związków o macierzystych funkcjach**, to jest struktur, które mogą być traktowane jak struktury macierzyste posiadające podstawialne atomy wodoru, ale posiadające też cechy normalnie wiązane z funkcyjnością, np. kwas octowy, CH_3-COOH, i kwas fosfonowy, $HP(O)(OH)_2$. Należy odróżniać związki o macierzystych funkcjach od związków mających grupy charakterystyczne systematycznie wprowadzane jako przyrostek dołączony do nazwy macierzystego wodorku. Takie związki można nazywać ‘sfunkcjonalizowanymi macierzystymi wodorkami’ chociaż biorąc ściśle, jony i rodniki nie mieszczą się w koncepcji funkcyjności jak opisano powyżej; centrum jonowe lub centrum rodnikowe traktuje się jak funkcję i wyraża tak samo jak grupę charakterystyczną, czyli przyrostkami i przedrostkami. Jest to opisane w tym rozdziale i w rozdziale P-7.

Każdą grupę można wyrazić w nazwie albo jako przyrostek albo przedrostek. Jako przedrostki, są one rozłączne (alfabetyzowane), podobnie jak przedrostki wywodzące się z macierzystych wodorków, dyskutowane w podrozdziale P-14.5.

P-31 MODYFIKACJA STOPNIA UWODORNIENIA MACIERZYSTEGO WODORKU

P-31.0 Wprowadzenie
P-31.1 Podstawniki z końcówkami ‘en’ i ‘yn(in’)
P-31.2 Podstawniki modyfikowane przedrostkami ‘hydro’ i ‘dehydro’

P-31.0 WPROWADZENIE

Macierzyste wodorki dzieli się na dwie grupy, w pełni nasycone i w pełni nienasycone. W pełni nienasycone cykliczne macierzyste wodorki są umownie definiowane jako mające maksymalną liczbę nie skumulowanych wiązań podwójnych i nazywane związkami ‘mancude’ (akronim od MAximum Number of non CUmulated DoublE bonds). Tak więc stopień uwodornienia różny od wymienionych powyżej musi być wyrażony operacjami addycji lub subtrakcji odpowiadającymi addycji lub subtrakcji atomów wodoru. Opracowano specjalne reguły dla związków mających zarówno części nasycone jak i nienasycone, takich jak cyklofany, związki spiro etc.

Stopień uwodornienia macierzystego wodorku modyfikuje się dwoma sposobami: (a) operacją subtrakcji (subtrakcja dwóch lub większej liczby atomów wodoru) wskazywaną końcówkami ‘en’ lub ‘yn’(‘in’) lub przedrostkiem ‘dehydro’; lub (b) operacja addycji (addycja dwóch lub większej liczby atomów wodoru) wskazywaną przedrostkiem ‘hydro’.

> W tych zaleceniach przedrostki ‘hydro’ i ‘dehydro’ są rozłączne, ale nie umieszczone w kategorii alfabetyzowalnych rozłącznych przedrostków (patrz P-14.4 a także P-15.1.5.2, P-31.2, P-58.2). Jest to zmiana w stosunku do wcześniejszych zaleceń (odn. 1,2). Kiedy wspólnie z końcówkami ‘en’ i ‘yn’(‘in’) stosuje się je do modyfikacji macierzystego wodorku, podlegają zasadzie najniższych lokantów, w zgodzie z numeracją macierzystego wodorku i po uwzględnieniu pierwszeństwa wskazanego atomu wodoru, dodanego wskazanego atomu wodoru i przyrostków, o ile są obecne, jak określono w ogólnych metodach numerowania (P-14.4)

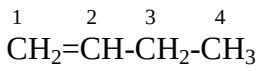
P-31.1 KOŃCÓWKI ‘EN’ I ‘YN’(‘IN’)

P-31.1.1 Ogólna metodologia

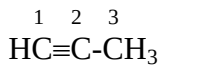
P-31.1.1.1 Obecność jednego lub więcej podwójnych lub potrójnych wiązań w poza tym nasyconym macierzystym wodorku [z wyjątkiem nazw Hantzscha-Widmana (patrz P-31.1.1.3), lub zachowanych nazw wskazujących częściowe uwodornienie jak opisano później (patrz 31.1.1.3)] wskazuje się zamieniając końcówkę ‘an’ w nazwie nasyconego macierzystego wodorku na ‘en’ lub ‘yn’(‘in’). Możliwie niskie lokanty przypisuje się wiązaniom wielokrotnym jako zestawowi, chociaż może to czasem dać niższe lokanty końcówkom ‘yn’ niż końcówkom ‘en’. Jeżeli istnieje wybór, podwójne wiązania mają pierwszeństwo w przypisywaniu niskich lokantów. W nazwach końcówka ‘en’ zawsze wyprzedza ‘yn’(‘in’). Wymienia się tylko niższy lokant podwójnego wiązania, chyba że różnica między lokantami byłaby większa od jedności, wtedy wyższy lokant podaje się w nawiasie.

Wyjątkowo, końcówki ‘en’ i ‘yn’(‘in’) mogą być dodane do końcówki ‘an’ w związkach spiro (patrz SP-2.4, odn. 8), nomenklaturze fanów (patrz PhII-5.3.1, odn. 6) i zespołów pierścieni (patrz P-31.1.7).

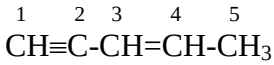
Przykłady:



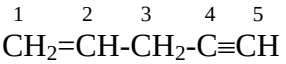
but-1-en (PIN)



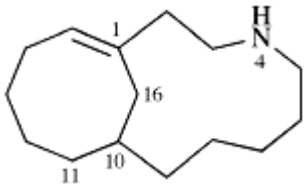
prop-1-yn (PIN)



pent-3-en-1-yn (PIN)



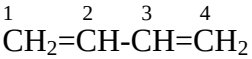
pent-1-en-4-yn (PIN)



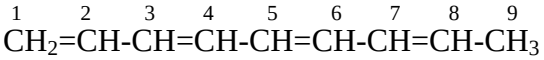
4-azabicyklo[8.5.1]heksadec-1(15)-en (PIN)

P-31.1.1.2 Przedrostki zwielokrotniające ‘di’, ‘tri’ itd. określające liczbę wiązań wielokrotnych każdego rodzaju umieszcza się bezpośrednio przed końcówkami wskazującymi nienasycenie, na przykład ‘dien’ i ‘triyn’. Nie pomija się końcowej litery ‘a’ zwielokrotniającego przedrostka przed ‘en’ lub ‘yn’(‘in’), na przykład ‘tetraen’ i ‘pentayn’.

Przykłady:



buta-1,3-dien (PIN)



nona-1,3,5,7-tetraen (PIN)

P-31.1.1.3 Metoda opisana w P-31.1.1 jest odpowiednia do następujących nasyconych węglowodorowych wodorków macierzystych i do odpowiadających im wodorków modyfikowanych nomenklatura zamienną ‘a’ opisanych w rozdziale P-2:

P-31.1.2	Acykliczne macierzyste wodorki
P-31.1.3	Monocykliczne wodorki macierzyste
P-31.1.4	Bi- i policykliczne macierzyste wodorki von Baeyera
P-31.1.5	Związki spiranowe z monocyklicznymi pierścieniami
P-31.1.6	Macierzyste wodorki fanowe
P-31.1.7	Zespoły pierścieni z nienasyconych składników

Metody tej nie stosuje się do modyfikowania nazw Hantzscha-Widmana dla nasyconych związków heterocyklicznych ani dla częściowo lub całkowicie uwodornionych związków mancude o zachowanych nazwach, np. imidazolina, morfolina, piperazyna, piperydyna, pirazolidyna, pirolidyna (Tabela 2.3), chinuklidyna (Tabela 2.6) a także indan, chroman, izochroman, ich chalkogenowe analogi oraz indolina i izoindolina (patrz Tabela 3.1). Jeżeli zachodzi taka konieczność, odpowiadające związki mancude modyfikuje się przedrostkami ‘hydro’ i ‘dehydro’ jak pokazano poniżej w P-31.2.

P-31.1.2 Acykliczne macierzyste wodorki

P-31.1.2.1 Zachowane nazwy

Nazwa acetylen jest zachowana dla związku HC≡CH. Jest to preferowana nazwa IUPAC, ale podstawienie nie jest dozwolone, chyba że w ogólnej nomenklaturze gdzie podstawienie jest dozwolone, np. fluoroacetylen [fluoroetyn (PIN)], ale nie podstawienie grupami alkilowymi ani innymi przedłużającymi łańcuch węglowy, ani grupami charakterystycznymi wyrażanymi przyrostkami.

Nazwa allen dla $CH_2=CH=CH_2$ jest zachowana tylko w nomenklaturze ogólnej; podstawienie jest dozwolone, ale nie podstawienie grupami alkilowymi ani innymi przedłużającymi łańcuch węglowy, ani grupami charakterystycznymi wyrażanymi przyrostkami. Nazwa systematyczna, propa-1,2-dien, jest preferowaną nazwą IUPAC.

Nazwa izopren dla $CH_2=C(CH_3)-CH=CH_2$ jest zachowana, ale tylko w ogólnej nomenklaturze; nie jest dozwolone żadne podstawienie. Systematyczna nazwa metylobuta-1,3-dien jest preferowaną nazwą IUPAC.

Nazwa formazan dla $\overset{1}{H}\overset{2}{N}=\overset{3}{N}-\overset{4}{C}H=\overset{5}{N}-NH_2$ jest zachowana i jest preferowaną nazwą IUPAC, w pełni podstawialną przyrostkami i przedrostkami.

Nazwa karbodiimid, dla HN=C=NH jest zachowana, ale tylko w ogólnej nomenklaturze; nie jest dozwolone żadne podstawienie. Preferowaną nazwą IUPAC jest nazwa systematyczna metanodiimina.

P-31.1.2.2 Nazwy systematyczne

P-31.1.2.2.1 Homogeniczne acykliczne wodorki macierzyste i acykliczne wodorki macierzyste zbudowane naprzemiennie z heteroatomów modyfikuje się ogólną metodą opisaną w P-31.1.1.

Przykłady:

$\overset{1}{CH_3}-\overset{2}{CH}=\overset{3}{CH}-\overset{4}{CH_2}-\overset{5}{CH_2}-\overset{6}{CH_3}$

heks-2-en (PIN)

$\overset{1}{CH_3}-\overset{2}{C}\equiv\overset{3}{C}-\overset{4}{CH_3}$

but-2-yn (PIN) (nie dimetyloacetylen)

$\overset{1}{CH_3}-\overset{2}{CH}=\overset{3}{C}=\overset{4}{CH}-\overset{5}{CH_2}-\overset{6}{CH_3}$

heksa-2,3-dien (PIN)
(nie 1-etylo-3-metyloallen)

$\overset{1}{CH_2}=\overset{2}{CH}-\overset{3}{CH}=\overset{4}{CH}-\overset{5}{C}\equiv\overset{6}{CH}$

heksa-1,3-dien-5-yn (PIN)

$\overset{1}{H_2}\overset{2}{N}-\overset{3}{N}=\overset{4}{N}-\overset{5}{NH}-NH_2$

pentaaz-2-en
(nazwa wstępnie wybrana, patrz P-12.2)

$\overset{1}{SiH_3}-\overset{2}{SiH}=\overset{3}{SiH}-\overset{4}{SiH_2}-\overset{5}{SiH_2}-\overset{6}{SiH_3}$

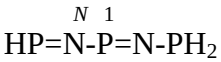
heksasil-2-en
(nazwa wstępnie wybrana, patrz P-12.2)

$\overset{1}{HSi}\equiv\overset{2}{SiH}$

disilin
(nazwa wstępnie wybrana, patrz P-12.2)

$\overset{1}{H_2}\overset{2}{Sn}=\overset{3}{P}-\overset{4}{SnH}=\overset{5}{P}-SnH_3$

tristannafosfa-1,3-dien
(nazwa wstępnie wybrana, patrz P-12.2)

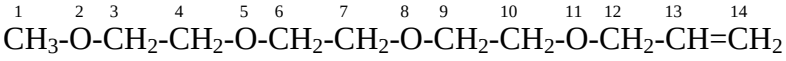


N-fosfanylideno-1-(fosfanyloimino)fosfanoamina
(nazwa wstępnie wybrana, patrz P-12.2)

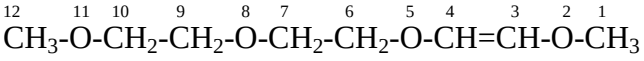
P-13.1.2.2.2 Acykliczne wodorki macierzyste modyfikowane nomenklaturą zamienną ‘a’ szkieletu

Lokanty przypisuje się miejscom nienasycenia w łańcuchach zgodnie z ustalonym numerowaniem hetero-łańcucha. Jeżeli istnieje możliwość wyboru, najniższe lokanty przypisuje się miejscom nienasycenia.

Przykłady:



2,5,8,11-tetraoksatetradec-13-en (PIN)



2,5,8,11-tetraoksadodec-3-en (PIN)

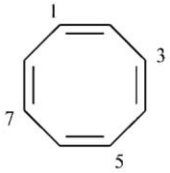
P-31.1.3 Monocykliczne wodorki macierzyste

P-31.1.3.1 W monocyklicznych homogenicznych nienasyconych związkach jedno podwójne lub jedno potrójne wiązanie zawsze ma lokant 1. Kiedy jest to jedyny lokant, pomijamy go w nazwie.

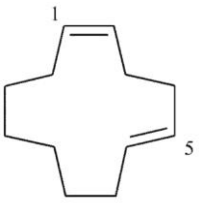
Przykłady:

cykloheksen (PIN)

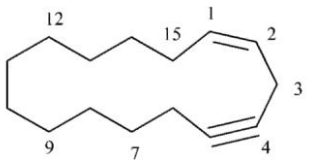
cykloheksa-1,4-dien (PIN)



cyklookta-1,3,5,7-tetraen (PIN)



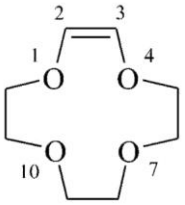
cyklododeka-1,5-dien (PIN)



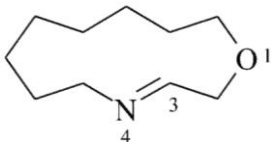
cyklopentadec-1-en-4-yn (PIN)

P-31.1.3.2 W pierścieniach modyfikowanych nomenklaturą zamienną ‘a’ szkieletu niskie lokanty przypisuje się najpierw heteroatomom, a potem miejscom nienasycenia.

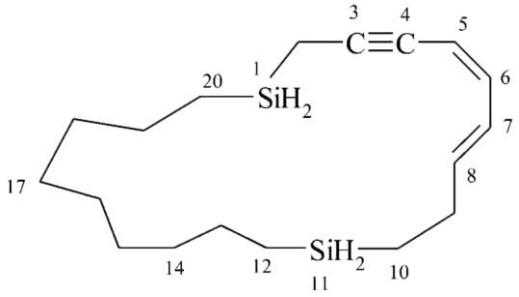
Przykłady:



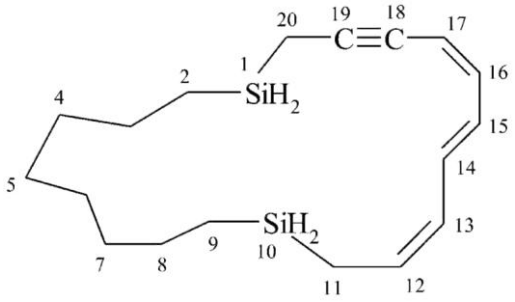
1,4,7,10-tetraoksacyklododec-2-en (PIN)



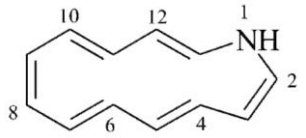
1-oksa-4-azacyklododec-3-en (PIN)



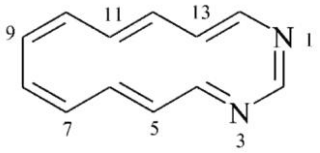
1,11-disilacykloikoza-5,7-dien-3-yn (PIN)
(nie 1,11-disilacykloikoza-4,6-dien-8-yn,
zestaw lokantów ‘3,5,7’ jest niższy od ‘4,6,8’)



1,10-disilacykloikoza-12,14,16-trien-18-yn (PIN)



1-azacyklotrideka-2,4,6,8,10,12-heksaen (PIN)
1*H*-1-aza[13]annulen

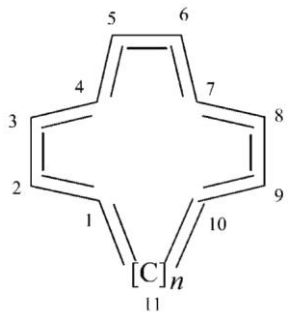


1,3-diazacyklotetradeka-1,3,5,7,9,11-heptaen (PIN)
1,3-diaza[14]annulen

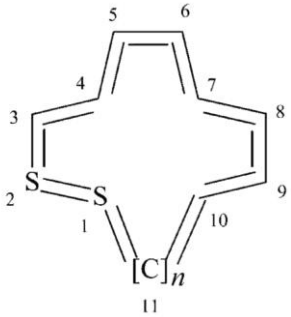
P-31.1.3.3 – Cykliczne kumuleny

Cykliczne kumuleny składają się wyłącznie z atomów, identycznych lub różnych, połączonych podwójnymi wiązaniami. W przypadku homocyklicznych kumulenów zaleca się pomijanie wszystkich lokantów w preferowanych nazwach IUPAC (patrz P-14.3.4.5).

Przykłady:



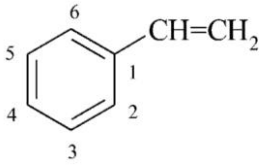
n = 11: cykloundekaundekaen (PIN)



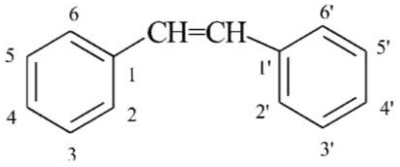
$1\lambda^4,2\lambda^4$-ditiacykloundekaundekaen (PIN)

P-31.1.3.4 Zachowane nazwy

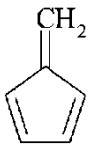
Styren, stilben i fulwen są jedynymi zachowanymi nazwami macierzystych wodorków zbudowanych z monocyklicznego układu pierścieni i nienasyconego łańcucha bocznego. Wszystkie te nazwy są używane wyłącznie w nomenklaturze ogólnej. Styren i stilben mogą być podstawiane tylko w pierścieniu i tylko tak jak opisano w P-15.1.8.2; fulwenu w ogóle nie wolno podstawiać



styren (tylko podstawienie w pierścieniu)
etenylobenzen (PIN)
winylobenzen



stilben (tylko podstawienie w pierścieniu)
1,1′-(eteno-1,2-diylo)dibenzen (PIN)

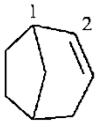


fulwen (bez podstawienia)
5-metylidenocyklopenta-1,3-dien

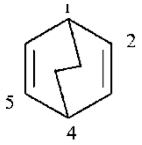
P-31.1.4 Bi- i policykliczne macierzyste wodorki von Baeyera

Należy zauważyć, że nazwy niektórych bi- i policyklicznych macierzystych wodorków von Baeyera nadają się do nomenklatury fanów jako preferowane nazwy IUPAC (patrz P-52.52.5).

Przykłady:



bicyklo[3.2.1]okt-2-en (PIN)



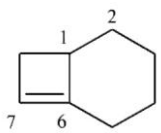
bicyklo[2.2.2]okta-2,5-dien (PIN)

P-31.1.4.2 Jeżeli istnieje wybór nazw i numerowania, stosuje się następujące kryteria aż do podjęcia decyzji:

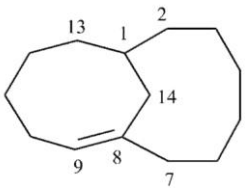
(1) minimalna liczba zespolonych lokantów. Zespolony lokant podwójnego wiązania stosuje się wtedy, gdy lokanty atomów na krańcach podwójnego wiązania nie różnią się o 1. Kiedy potrzebny jest zespolony lokant, wyższy lokant podaje się w nawiasie. Pokazano i opisano pierścień benzenu jako cykloheksatrien odpowiadający strukturze Kekulego. W razie potrzeby inne pierścienie aromatyczne traktuje się podobnie.

Uwaga: Starszeństwo pojedynczych lokantów względem lokantów zespolonych ustalono w 1989 roku dla numerowania steroidów (patrz S3-2.5(2), odn. 16) i rozszerzono na układy von Baeyera w publikacji z 1990 roku (patrz VB-8.3, odn. 7).

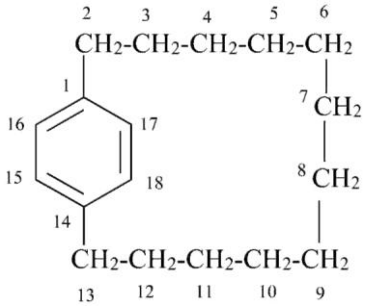
Przykłady**:**



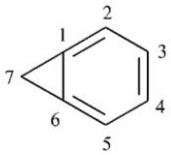
bicyklo[4.2.0]okt-6-en (PIN)
{nie bicyklo[4.2.0]okt-1(8)-en}



bicyklo[6.5.1]tetradec-8-en (PIN)
{nie bicyklo[6.5.1]tetradec-1(13)en}



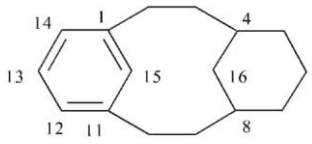
bicyklo[12.2.2]oktadeka-1(16),14,17-trien
{nie bicyklo[12.2.2]oktadeka-1(17),14(18),15-trien}
1(1,4)-benzenacyklotridekafan (PIN, patrz P-52.2.5)



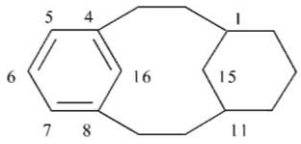
bicyklo[4.1.0]hepta-1,3,5-trien (PIN)
{nie bicyklo[4.1.0]hepta-1(6),2,4-trien}

(2) przy porównywaniu lokantów podwójnych wiązań wśród których są zespolone lokanty, ignoruje się liczby w nawiasach.

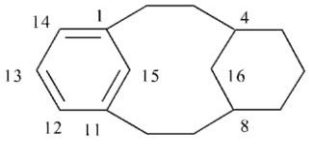
Przykłady:



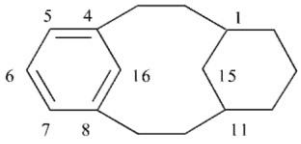
(I)



(II)

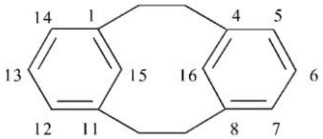


(III)



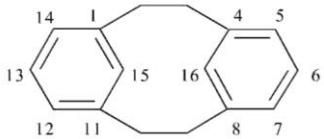
(IV)

tricyklo[9.3.1.1^{4,8}]heksadeka-1(15),11,13-trien (**I**) (PIN)
{nie tricyklo[9.3.1.1^{4,8}]heksadeka-4(16),5,7-trien (**II**);
ani tricyklo[9.3.1.1^{4,8}]heksadeka-4,6,8(16)-trien (**III**);
ani tricyklo[9.3.1.1^{4,8}]heksadeka-1(14),11(15),12-trien (**IV**);
zestaw lokantów ‘1,11,13’ w (**I**) jest niższy niż ‘4,5,7’ w (**II**)
oraz ‘4,6,8’ w (**III**); (**IV**) ma dwa zespolone lokanty a (**I**) tylko jeden}
1(1,3)-benzena-4(1,3-cykloheksanacykloheksafan (PIN, patrz P-52.2.5)



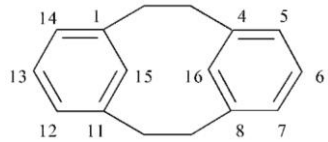
(I)

nie



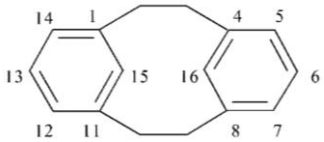
(II)

nie



(III)

nie

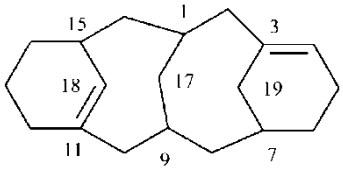


(IV)

tricyklo[9.3.1.1^{4,8}]heksadeka-1(15),4(16),5,7,11,13-heksaen (**I**) (PIN)
{nie tricyklo[9.3.1.1^{4,8}]heksadeka-1(15),4,6,8(16),11,13-heksaen (**II**)
ani tricyklo[9.3.1.1^{4,8}]heksadeka-1(14),4,6,8(16),11(15),12-heksaen (**III**)
ani tricyklo[9.3.1.1^{4,8}]heksadeka-1(14),4(16),5,7,11(15),12-heksaen (**IV**);
zestaw lokantów w (**I**) ‘1,4,5,7,11,13’ jest niższy od ‘1,4,6,8,11,13’ w (**II**),
a także nazwa w (**I**) ma dwa zespolone lokanty, a nazwy (**III**) i (**IV**) mają po trzy}
1,4(1,3)-dibenzenacykloheksafan (PIN, patrz P-52.2.5)

(3) Jeżeli nadal istnieje możliwość wyboru, niższe lokanty wybiera się rozpatrując wszystkie lokanty, łącznie z tymi w nawiasach, jako zestaw,

Przykład:

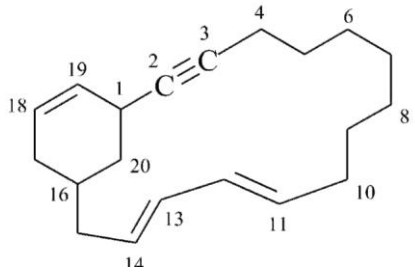


tetracyklo[7.7.1.1^{3,7},1^{11,15}]nonadeka-3,11(18)-dien (PIN)
{nie tetracyklo[7.7.1.1^{3,7},1^{11,15}]nona deka-3(19),11-dien;
zestaw lokantów ‘3,11,(18)’ jest niższy od ‘3,11,(19)’}

P-31.1.4.3 Bi- i policykliczne struktury von Baeyera, z wiązaniami podwójnymi i potrójnymi. Jeżeli są obecne zarówno wiązania podwójne jak i potrójne to stosuje się poniższe kryteria aż do podjęcia decyzji.

(1) niższe lokanty przypisuje się wiązaniom wielokrotnym jako zestawowi;

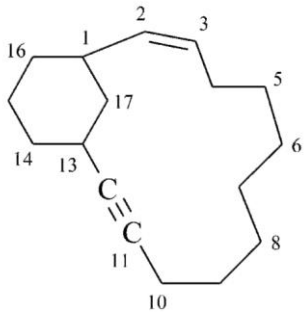
Przykład:



bicyklo[14.3.1]ikoza-11,13,18-trien-2-yn (PIN)
(nie bicyklo[14.3.1]ikoza-3,5,17-trien-14-yn;
zestaw lokantów ‘2,11,13,18’ jest niższy od ‘3,5,14,17’)

(2) niższe lokanty przypisuje się wiązaniom podwójnym;

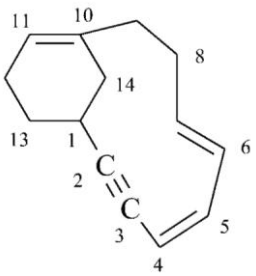
Przykład:



bicyklo[11.3.1]heptadec-2-en-11-yn (PIN)
(nie bicyklo[11.3.1]heptadec-11-en-2-yn)

(3) ograniczenie do minimum liczby zespolonych lokantów

Przykład:

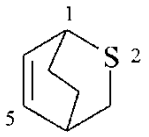


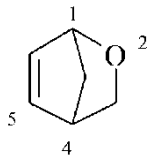
bicyklo[8.3.1]tetradeka-4,6,10-trien-2-yn (PIN)
(nie bicyklo[8.3.1]tetradeka-1(13),4,6-trien-8-yn)

P-31.1.4.4 Bi- i policykliczne związki heterocykliczne von Baeyera nazywane według nomenklatury zamiennej ‘a’ szkieletu. W nazwach zamiennych ‘a’ związków heterocyklicznych

niższe lokanty przypisuje się najpierw heteroatomom, zgodnie z ustalonym numerowaniem, a następnie miejscom nienasycenia.

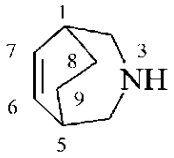
Przykłady:





2-tiabicyklo[2.2.2]okt-5-en (PIN)

2-oksabicyklo[2.2.1]hept-5-en (PIN)



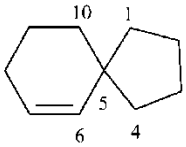
3-azabicyklo[3.2.2]non-6-en (PIN)

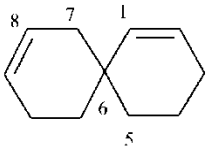
P-31.1.5 Związki spiranowe z monocyklicznymi pierścieniami

P-31.1.5.1 Związki spiranowe złożone z nienasyconych pierścieni

P-31.1.5.1.1 Niskie lokanty przypisuje się wiązaniom podwójnym, w zgodzie z ustalonym systemem numerowania związków spiranowych.

Przykłady:





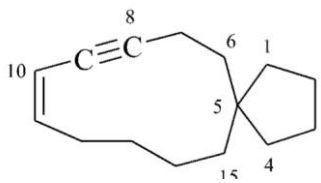
spiro[4.5]dec-6-en (PIN)

spiro[5.5]undeka-1,8-dien (PIN)

P-31.1.5.1.2 Jeżeli obok wiązań podwójnych obecne są wiązania potrójne, podane poniżej kryteria rozpatruje się kolejno aż do podjęcia decyzji.

(1) lokanty przypisuje się wiązaniom wielokrotnym jako zestawowi:

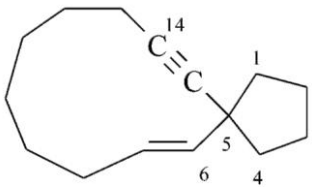
Przykład:



spiro[4.10]pentadec-10-en-8-yn (PIN)

(2) jeżeli wciąż istnieje wybór, niskie lokanty przypisuje się wiązaniom podwójnym.

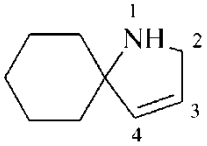
Przykład:



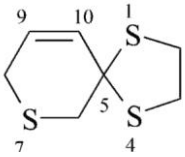
spiro-[4.10]pentadec-6-en-14-yn (PIN)

P-31.1.5.1.3 Heteroatom w związku spiranowym zbudowanym z monocyklicznych pierścieni nazywanych nomenklaturą zamienną szkieletu (‘a’) mają pierwszeństwo do niskich lokantów.

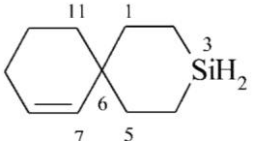
Przykłady:



1-azaspiro[4.5]dec-3-en (PIN)



1,4,7-tritiaspiro[4.5]-dec-9-en (PIN)



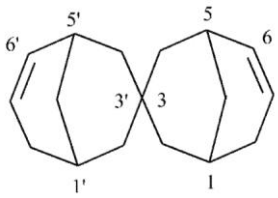
3-silaspiro[5.5]undec-7-en (PIN)

P-31.1.5.2 Związki spiranowe zbudowane z nasyconych policyklicznych składników von Baeyera.

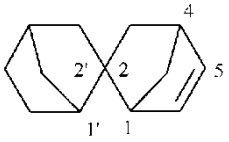
P-31.1.5.2.1 Nienasycenie w nasyconych spiranowych układach pierścieni, nazywanych według systemu von Baeyera, wskazuje się końcówkami ‘en’ i, w miarę potrzeby, przedrostkami zwielokrotniającymi ‘di’, ‘tri’ etc.; końcówkę ‘en’ wymienia się po ostatnim nawiasie kwadratowym w nazwie spiro. Jeżeli istnieje możliwość wyboru, niskie lokanty przypisuje się kolejno złączeniu spiro, heteroatomom i podwójnym wiązaniom (patrz SP-2.4 w odn. 8).

Uwaga Umiejscowienie końcówki ‘en’ po zamykającym nawiasie kwadratowym w macierzystej nazwie spiro zostało przyjęte w publikacji o nomenklaturze związków spiranowych (odn.4).

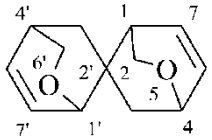
Przykłady:



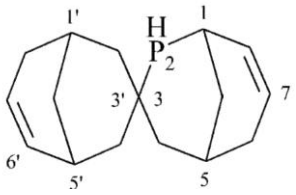
3,3′-spirobi[bicyklo[3.3.1]nonano]-6,6′-dien (PIN)



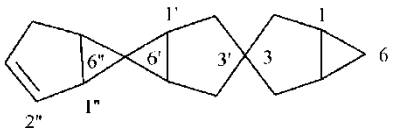
2,2′-spirobi[bicyklo[2.2.1]heptan]-5-en (PIN)



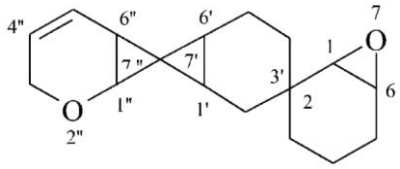
5,6′-dioksa-2,2′-spirobi[bicyklo[2.2.2]oktano]-7,7′-dien (PIN)



2-fosfa-3,3′-spirobi[bicyklo[3.3.1]nonano]-6′,7-dien (PIN)



3,3′,6′,6″-dispiroter[bicyklo[3.1.0]heksan]-2″-en (PIN)



2″,7-dioksa-2,3′:7′,7″-dispiroter[bicyklo[4.1.0]heksan]-4″-en (PIN)
[nie 5″,7-dioksa-2,3′:7′,7″-dispiroter[bicyklo[4.1.0]heksan]-2″-en;
zestaw lokantów dla przedrostków ‘oksa’ ‘2″,7’ jest niższy od ‘5″,7’]

P-31.1.6 Macierzyste wodorki fanowe

P-31.1.6.1 Wiązania podwójne w amplifikantach i w uproszczonych szkieletach fanów

Obecność jednego lub więcej wiązań podwójnych lub potrójnych w poza tym nasyconym macierzystym wodorku fanu, z wyjątkiem amplifikantów z nazwami Hantzscha-Widmana, wskazuje się dodając do nazwy macierzystego wodorku fanu końcówki ‘en’ lub ‘yn’(‘in’) z odpowiednimi przedrostkami zwielokrotniającymi określającymi wielokrotność każdego rodzaju miejsc nienasycenia (odn. 6, PhII-5.3).

Niskie lokanty nadaje się wiązaniom podwójnym i potrójnym, w zgodzie z ustalonym numerowaniem macierzystego wodorku fanu i macierzystego wodorku fanu modyfikowanego

nomenklaturą zamienną ‘a’ szkieletu. Do pełnego opisu związków wywodzących się z macierzystych wodorków fanów stosuje się trzy rodzaje lokantów:

(1) podstawowe lokanty; to znaczy arabskie liczbowe lokanty wskazujące atomy i superatomy macierzystego szkieletu fanu;

(2) złożone lokanty, czyli podstawowe lokanty z indeksami górnymi określającymi pozycje amplifikantów (patrz P-26.4.3)

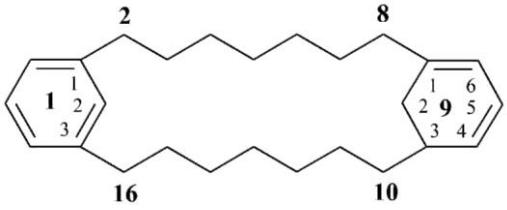
(3) zespolone lokanty będące podstawowymi lub złożonymi lokantami, po których następuje inny lokant w nawiasie wskazując, że wiązanie podwójne nie znajduje się między dwoma kolejnymi lokantami.

W nomenklaturze fanów wiązania podwójne i potrójne wskazuje się dwoma metodami:

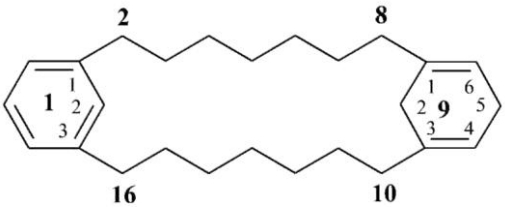
(1) niższym lokantem podwójnego lub potrójnego wiązania, kiedy dwa kolejne lokanty są:
(a) podstawowymi lokantami; lub
(b) złożonymi lokantami, z których żaden nie sąsiaduje z podstawowym lokantem;

(2) złożonym lokantem, kiedy jeden lokant jest zespolonym lokantem sąsiadującym z podstawowym lokantem.

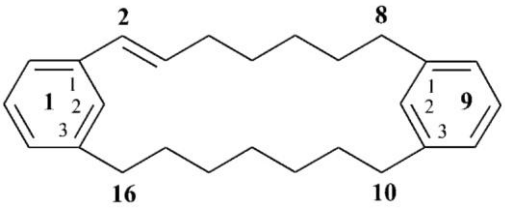
Przykłady:



1(1,3)-benzena-9(1,3)cykloheksanacykloheksadekafan-$9^1(9^6),9^4$-dien (PIN)



1(1,3)-benzena-9(1,3)cykloheksanacykloheksadekafan-$9^1(9^6),9^3(9^4)$-dien (PIN)

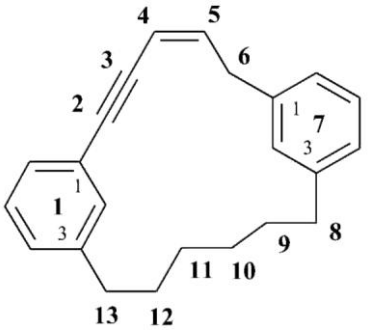


1,9(1,3)-dibenzenacykloheksadekafan-2-en (PIN)

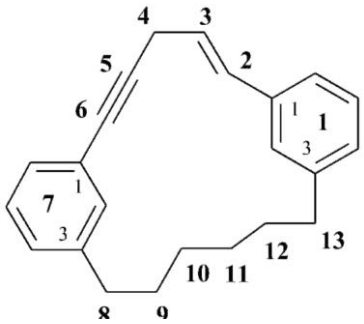
P-31.1.6.2 Struktury fanów z wiązaniami podwójnymi i potrójnymi

Podwójne i potrójne wiązania w strukturze fanu wpisuje się metodą z P-31.1.4.3. Niskie lokanty przypisuje się najpierw wiązaniom podwójnym i potrójnym jako zestawowi w malejącym porządku, a jeżeli jeszcze istnieje wybór – wiązaniom podwójnym.

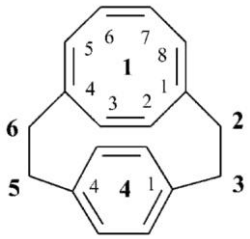
Przykłady:



1,7(1,3)-dibenzenacyklotridecafan-4-en-2-yn (PIN)



1,7(1,3)-dibenzenacyklotridekafan-2-en-5-yn (PIN)



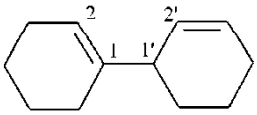
(1,4)-cyklooktana-4-(1,4)benzenacykloheksafan-$-1^{1}(1^{8}),1^{2},1^{4},1^{6}$-tetraen (PIN)

P-31.1.7 Zespoły pierścieni z nienasyconych składników

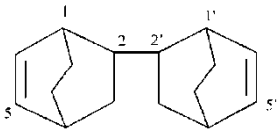
P-31.1.7.1 Nienasycenie w zespołach pierścieni złożonych z nasyconych składników, monocyklicznych lub acyklicznych, wskazuje się końcówkami ‘en’ i ‘yn’ (‘-in’) i zwielokrotniającymi przedrostkami ‘di’, ‘tri’ etc., końcówki wymienia się po ostatnim nawiasie kwadratowym w nazwie zespołu pierścieni. Jeżeli istnieje możliwość wyboru, najniższe lokanty przypisuje się, kolejno, atomom węzłowym zespołu pierścieni, heteroatomom i wiązaniom wielokrotnym (patrz także P-31.1.5.2).

Umieszczenie końcówek ‘en’ i ‘yn’(‘in’) po zamykającym nawiasie kwadratowym w nazwach zespołów pierścieni jest zmianą w stosunku do wydania z 1979 i Przewodnika z 1993 roku (odn. 1 i 2), ale jest zgodne z metodą ustaloną dla związków spiranowych i opublikowaną w 1999r. (odn. 4).

Przykłady:

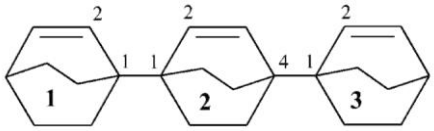


[1,1′-bi(cykloheksano)]-1,2′-dien (PIN)



[2,2′-bi(bicyklo[2.2.2]oktano)]-5,5′-dien (PIN)

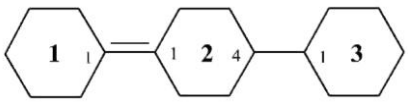
[1^1,2^1:2^4,3^1-tercykloheksano]-1^2,2^1-dien (PIN)
[1,1′:4′,1″-tercykloheksano]-1′,2-dien



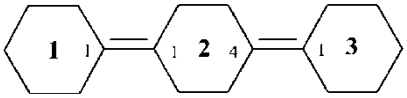
[1^1,2^1:2^4,3^1-terbicyklo[2.2.2]oktano]-1^2,2^2,3^2-trien (PIN)
[1,1′:4′,1″-terbicyklo[2,2,2]oktano]2,2′,2″-trien

P-31.1.7.2 Podwójne wiązania łączące dwa pierścienie lub układy pierścieni zapisuje się tak samo jak zespoły pierścieni złożone z trzech lub więcej nasyconych składników. Lokanty krańcowych pozycji takich wiązań zamyka się w nawiasie (zespolone lokanty).

Przykłady:



[1^1,2^1:2^4,3^1-tercykloheksan]-1^1(2^1)-en (PIN)
[1,1′:4′,1″-tercykloheksan-1(1′)-en

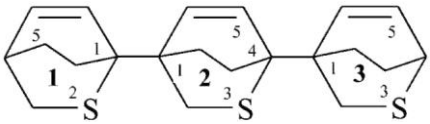


[1^1,2^1:2^4,3^1-tercykloheksano]-1^1(2^1),2^4(3^1)-dien (PIN)
[1,1′:4′,1″-tercykloheksano]-1(1′),4′(1″)-dien

[1^1,2^1:2^4,3^1-tercykloheksano]-1^1(2^1),2^2,3^2-trien (PIN)
[1,1′:4′,1″-tercykloheksano]-1(1′),2′,2″-trien

P-31.1.7.3 Kiedy heterocykliczne zespoły pierścieni zbudowane z monocyklicznych, bi- lub polialicyklicznych składników nazywa się według nomenklatury zamiennej ‘a’ szkieletu, niskie lokanty przypisuje się, kolejno, złączeniom pierścieni, heteroatomom i wreszcie miejscom nienasycenia.

Przykład:



1^2,2^3,3^3-tritia[1^1,2^1:2^4,3^1-terbicyklo[2.2.2]oktano]-1^5,2^5,3^5-trien (PIN)
2,3′,3″-tritia[1,1′:4′,1″-terbicyklo[2.2.2]oktano]-5,5′,5″-trien

P-31.2 PRZEDROSTKI ‘HYDRO’ I ‘DEHYDRO’

P-31.2.1 Przedrostki 'hydro’/‘dehydro’ używa się do wskazania addycji lub subtrakcji, odpowiednio do lub od związku mancude. Przedrostki ‘hydro’ i ‘dehydro’ są przedrostkami rozłącznymi, ale nie uwzględnia się ich wśród przedrostków wymienianych w kolejności alfabetycznej. Tak więc w nazwach wymienia się je bezpośrednio przed początkiem nazwy macierzystego wodorku, po zalfabetyzowanych przedrostkach i przed nierozłącznymi przedrostkami.

Jest to zmiana w stosunku do poprzednich rekomendacji. W tych zaleceniach przedrostki ‘hydro’ i ‘dehydro’ są rozłączne ale nie alfabetyzowane z innymi przedrostkami podstawnikowymi. W nazwach wymienia się je bezpośrednio przed nazwą macierzystego wodorku, po alfabetyzowanych przedrostkach i przed nierozłącznymi przedrostkami.

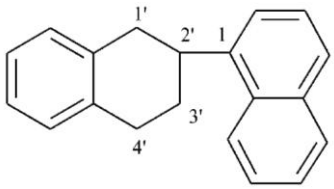
Początek i kierunek numerowania związku wybrane są tak, aby najniższe lokanty przypisać ustalonemu numerowaniu policyklicznego układu pierścieni, jak w naftalenie, chinolinie itd.,

następnie heteroatomom w związkach heterocyklicznych, kolejno, i o ile jest, wskazanemu atomowi wodoru zgodnie z opisaną w P-14.4 metodologią konstruowania nazw podstawnikowych.

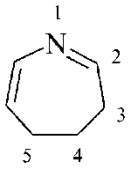
P-31.2.2 Ogólna metodologia

Przedrostki ‘hydro’ i ‘dehydro’ są związane z hydrogenacją i dehydrogenacją (uwodornieniem i odwodornieniem) podwójnego wiązania; stąd przedrostki zwielokrotniające o wartościach parzystych, jak ‘di‘, ‘tetra’ etc. wskazują nasycenie podwójnego wiązania, na przykład 'dihydro', ‘tetrahydro’ lub powstanie podwójnych (bądź potrójnych) wiązań – ‘di’, ‘dehydro’ etc. W nazwach te przedrostki umieszcza się bezpośrednio przed początkiem nazwy macierzystego wodorku i przed nierozłącznymi przedrostkami. W przypisaniu najniższych lokantów wskazany atom wodoru ma pierwszeństwo przed przedrostkami ‘hydro’. Jeżeli w nazwie występuje wskazany atom wodoru to przedrostki ‘hydro’ poprzedzają go.

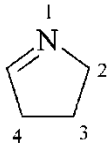
Przykłady:



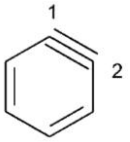
1′,2′,3′,4′ -tetrahydro-1,2′-binaftalen (PIN)



4,5-dihydro-3*H*-azepina (PIN)



3,4-dihydro-2*H*-pirol (PIN)

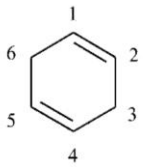


1,2-didehydrobenzen (PIN, patrz P-31.2.4.1)
cykloheksa-1,3-dien-5-yn
(nie benzyn)

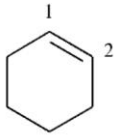
P-31.2.3 Przedrostek’hydro’

P-31.2.3.1 Przedrostki ‘hydro’ stosuje się do modyfikowania stopnia hydrogenacji monocyklicznych związków mancude mających zachowane lub systematyczne nazwy; wyjątkiem są ‘hydro’ pochodne benzenu, dla których preferowanymi nazwami IUPAC są ‘cykloheksen’ i ‘cykloheksadien’.

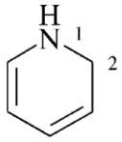
Przykłady:



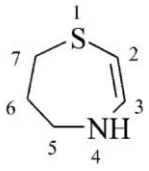
cykloheksa-1,4-dien PIN)
(nie 1,4-dihydrobenzen)



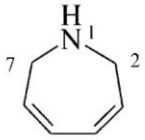
cykloheksen (PIN)
(nie 1,2,3,4-tetrahydrobenzen)



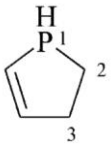
1,2-dihydropirydyna (PIN)



4,5,6,7-tetrahydro-1,4-tiazepina (PIN)



2,7-dihydro-1*H*-azepina (PIN)

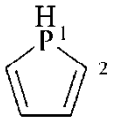


2,3-dihydro-1*H*-fosfol (PIN)

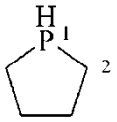
P-31.2.3.2 Nazwy nasyconych związków heteromonocyklicznych

Preferowanymi nazwami IUPAC nasyconych związków heteromonocyklicznych są albo nazwy Hantzscha-Widmana opisane w P-22.2.2.1.1 lub nazwy zachowane przedstawione w Tabeli 2.3. Nazwy nasyconych pierścieni otrzymane przez dodanie przedrostków hydro do nazw Hantzscha-Widmana, zachowane nazwy modyfikowane przez dodanie maksymalnej liczby przedrostków hydro, lub nazwy 'cyklo' opisane w P-22.2.5 nie są preferowanymi nazwami IUPAC, ale mogą być używane w ogólnej nomenklaturze.

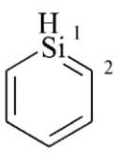
Przykłady:



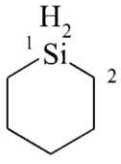
1*H*-fosfol (PIN)



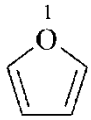
fosfolan (PIN)
tetrahydro-1*H*-fosfol



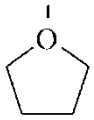
silin (PIN)



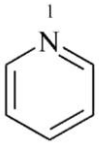
silinan (PIN)
heksahydrosilin



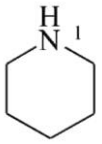
furan (PIN)



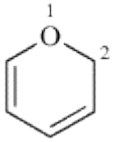
oksolan (PIN)
tetrahydrofuran



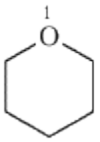
pirydyna (PIN)



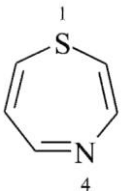
piperydyna (PIN)
heksahydropirydyna



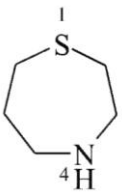
2*H*-piran (PIN)



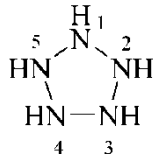
oksan (PIN)
tetrahydropiran



1,4-tiazepina (PIN)



1,4-tiazepan (PIN)
heksahydro-1,4-tiazepina



cyklopentaazan
pentazolidyna
pentazolan
(nazwa wstępnie wybrana; patrz P-12.1; P-22.25)

P-31.2.3.3 Nasycenie podwójnych wiązań w policyklicznych związkach mancude

P-31.2.3.3.1 Zachowane nazwy częściowo nasyconych policyklicznych związków mancude

P-31.2.3.3.2 Policykliczne związki mancude

P-31.2.3.3.3 Związki spiranowe

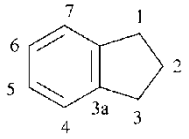
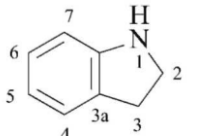
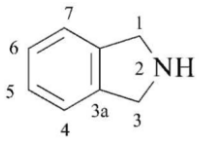
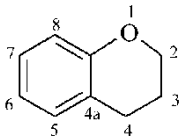
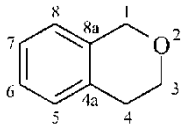
P-31.2.3.3.4 Związki fanowe

P-31.2.3.3.5 Zespoły pierścieni

P-31.2.3.3.1 Zachowane nazwy częściowo nasyconych policyklicznych związków mancude

Nazwy w Tabeli 3.1 są nazwami zachowanymi, ale nie są to nazwy preferowane IUPAC-u. Są za to akceptowane w ogólnej nomenklaturze, z pełnymi możliwościami podstawiania i tworzenia przyrostków podstawnikowych z utworzonych grup, ale nie mogą być stosowane jako składniki skondensowania ani jako amplifikanty w nomenklaturze fanów.

Tabela 3.1 Zachowane nazwy częściowo nasyconych wodorków macierzystych

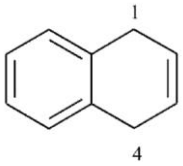
	indan 2,3-dihydro-1*H*-inden (PIN)
	
1*H*-indolina 2,3-dihydro-1*H*-indol (PIN)	2*H*-izoindolina 2,3-dihydro-1*H*-izoindol (PIN)
	
chroman 3,4-dihydro-2*H*-1-benzopiran (PIN) 3,4-dihydro-2*H*-chromen	izochroman 3,4-dihydro-1*H*-2-benzopiran (PIN) 3,4-dihydro-1*H*-chromen
tiochroman (S zamiast O) 3,4-dihydro-2*H*-1-benzotiopiran (PIN) 3,4-dihydro-2*H*-tiochromen	izotiochroman (*S* zamiast *O*) 3,4-dihydro-1*H*-2-benzotiopiran (PIN) 3,4-dihydro-1*H*-izotiochromen
selenochroman (Se zamiast O) 3,4-dihydro-2*H*-1-benzoselenopiran (PIN) 3,4-dihydro-2*H*-selenochromen	izoselenochroman 3,4-dihydro-1*H*-2-benzoselenopiran (PIN) 3,4-dihydro-1*H*-izoselenochromen
tellurochroman (Te zamiast O) 3,4-dihydro-2*H*-1-benzotelluropiran (PIN) 3,4-dihydro-2*H*-tellurochromen	izotellurochroman (Te zamiast O) 3,4-dihydro-1*H*-2-benzotelluropiran (PIN) 3,4-dihydro-1*H*-izotellurochromen

P-31.2.3.3.2 Policykliczne związki mancude

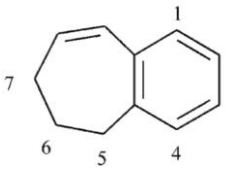
Stopień hydrogenacji częściowo lub całkowicie nasyconych indywidualnych układów pierścieni mancude, karbocyklicznych lub heterocyklicznych, podaje się przedrostkami ‘hydro’ w zgodzie z ogólną metodologią opisaną w P-31.2.2. Pełne uwodornienie wskazuje się odpowiednimi

przedrostkami zwielokrotniającymi pokazującymi pełną liczbę przyłączonych atomów wodoru, ale pomija się lokanty (patrz P-14.3.4.5).

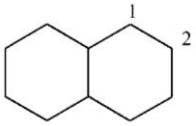
Przykłady:



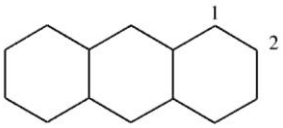
1,4-dihydronaftalen (PIN)



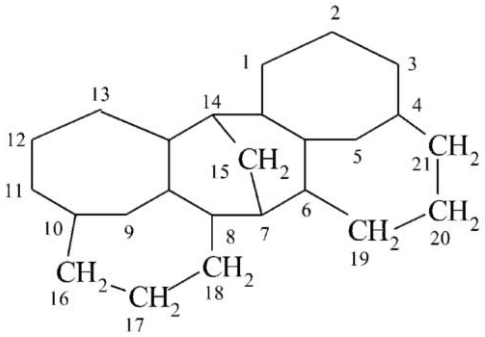
6,7-dihydro-5*H*-benzo[7]annulen (PIN)



dekahydronaftalen (PIN)



tetradekahydroantracen (PIN)

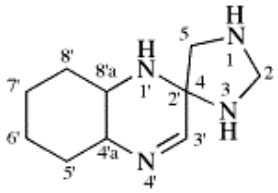


oktadekahydro-7,14-metano-4,6:8,10-dipropanodicyklohepta[*a*,*d*][8]annulen (PIN)
heksacyklo[15.3.2.2^{3,7}.1^{2,12}.0^{13,21}.0^{11,25}]pentakozan (patrz P-23.2.6.3)

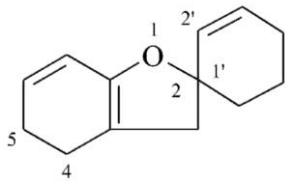
P-31.2.3.3.3 Związki spiranowe

Związki spiranowe, w tym składniki mancude, modyfikuje się zgodnie z ogólną metodologią opisaną w P-31.2.2.

Przykłady:



4′a,5′,6′,7′,8′,8′a-heksahydro-1′*H*-spiro[imidazolino-4,2′-chinoksalina] (PIN)



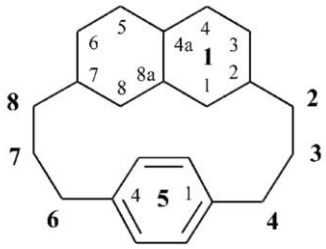
4,5-dihydro-3*H*-spiro[1-benzofurano-2,1′-cykloheksan]-2′-en (PIN)

P-31.2.3.3.4 Związki fanowe

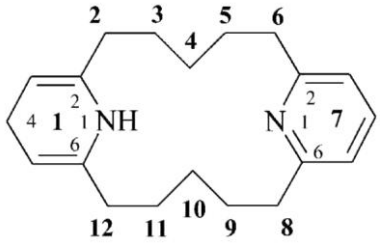
Jeżeli nazwa amplifikanta zakłada obecność maksymalnej liczby nieskumulowanych wiązań podwójnych, to inne stany hydrogenacji wskazuje się przedrostkami ‘hydro’. Metodę tę stosuje się następująco (patrz odn. 6, PhII-5.1 i PhII.5.2):

(1) Przedrostki ‘hydro’ stosuje się do modyfikowania monocyklicznych mancude związków heterocyklicznych lub nazywanych według rozszerzonego systemu Hantzscha-Widmana. Jednakże nazwy w pełni nasyconych heteromonocykli, które mają nazwy zachowane lub nazwy Hantzscha-Widmana są preferowane względem tych używających przedrostki ‘hydro’, na przykład oksolan i piperydyna są preferowane względem tetrahydrofuranu i heksahydropirydyny.

Przykłady:



1^{1},1^{2},1^{3},1^{4},1^{4a},1^{5},1^{6},1^{7},1^{8},1^{8a}-dekahydro-1(2,7)-naftalena-5(1,4)- benzenacyklooktafan (PIN)



1^{1},1^{4}-dihydro-1,7(2,6)-dipirydynacyklododekafan (PIN)

P-31.2.3.3.5 Zespoły pierścieni

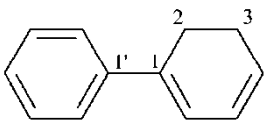
Stopień uwodornienia (hydrogenacji) zespołów pierścieni złożonych ze składników mancude podaje się przedrostkami ‘hydro’, zgodnie z ogólna metodologią opisaną w P-31.1.1. Ponieważ te zespoły uważa się za macierzyste wodorki, stopień hydrogenacji różnych składników można modyfikować, do pewnego stopnia, w sposób dozwolony dla poszczególnych składników. To jest przypadek zespołów złożonych ze składników monocyklicznych mających różne nazwy składników mancude i nasyconych. Tak więc zespoły złożone z monocyklicznych składników i te złożone z układów pierścieni traktuje się w różny sposób.

P-31.2.3.3.5.1 Zespoły pierścieni złożone z monocyklicznych składników
P-31.2.3.3.5.2 Zespoły pierścieni złożone z układów pierścieni

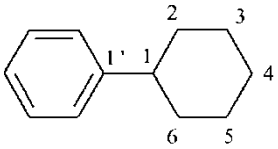
P-31.2.3.3.5.1 Zespoły pierścieni złożone z monocyklicznych składników

(a) Zespoły pierścieni złożone z monocyklicznych składników mancude i nasyconych węglowodorów. Niskie lokanty przypisuje się przedrostkom ‘hydro’ w zgodzie z ustalonym numerowaniem każdego zespołu. W zespołach: bifenyl i polifenyl, musi pozostać jeden pierścień benzenowy; w innym przypadku wyjściowy macierzysty wodorek jest zespołem nasyconym i do wskazania nienasycenia stosuje się końcówkę ‘en’ (patrz P-31.1.7). Poza tym jeżeli modyfikowany zespół dwóch pierścieni składa się z pierścienia benzenu i pierścienia cykloheksanu to preferowana jest nomenklatura podstawnikowa (patrz rozdział P-5).

Przykłady:

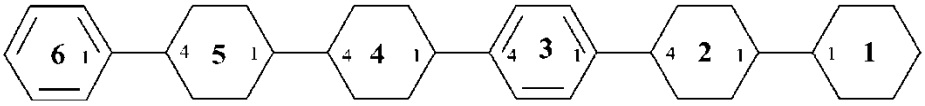


2,3-dihydro-1,1′-bifenyl (PIN)
(pokazano numerowanie)
1-(cykloheksa-1,3-dien-1-ylo)benzen



cykloheksylobenzen (PIN)
1,2,3,4,5,6-heksahydro-1,1′-bifenyl
(pokazano numerowanie)

1^2,1^5,2^2,2^3-tetrahydro-1^1,2^1:2^4,3^1-terfenyl (PIN)
2,2′,3′,5-tetrahydro-1,1′:4′,1″-terfenyl
[4-(cykloheksa-1,4-dien-1-ylo)cykloheksa-1,3-dien-1-ylo]benzen
(nazwa podstawnikowa)



$1^1,1^2,1^3,1^4,1^5,1^6,2^1,2^2,2^3,2^4,2^5,2^6,4^1,4^2,4^3,4^4,4^5,4^6,5^1,5^2,5^3,5^4,5^5,5^6$-tetrakozahydro-$1^1,2^1:2^4,3^1:3^4,4^1:4^4,5^1:5^4,6^1$-seksifenyl (PIN)

1,1′,1‴,1⁗, 2,2′,2‴,2⁗,3,3′,3‴,3⁗,4,4′,4‴,4⁗,5,5,5‴,5⁗,6,6′,6‴,6⁗-tetrakoza-hydro-1,1′: 4′,1″:4″,1‴:4⁗,1⁗′-seksifenyl

4-[([1,1′-bi(cykloheksan)]-4-yl)fenylo]-4′-fenylo-1,1′-bi(cykloheksan)
(nazwa podstawnikowa)

{nie 1-($1^1,1^2,1^3,1^4,1^5,1^6,2^1,2^2,2^3,2^4,2^5,2^6$-dodekahydro[$1^1,2^1:2^4,3^1$-terfenylo]-$4^1$-yl)-4-[1,1′-bi(cyclohexan]-4-ylo]benzen (nazwa podstawnikowa)

Uwaga: Zgodnie z P-52.2.5.1, aby utworzyć nazwę dla fanu wymaganych jest siedem węzłów.

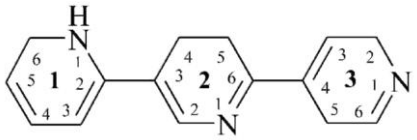
1(1),4(1,4)-dibenzena-2,3,5,6(1,4),7(1)-pentacykloheksanaheptafan (PIN)
(pokazano numerację)

1^4-[4-(4′-fenylo[1,1′-bi(cykloheksan)]-4-ylo)fenylo)-$1^1,2^1:2^4,3^1$-tercykloheksan
(nazwa podstawnikowa)

4-[4-(4′-fenylo[1,1′-bi(cykloheksan)]-4-ylo)fenylo]-1,1′:4′,1″-tercykloheksan
(nazwa podstawnikowa)

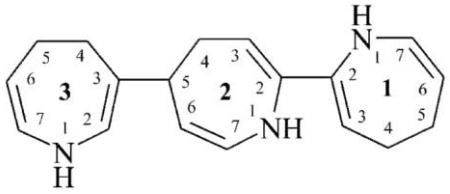
(b) Zespoły pierścieni zbudowane z heteromonocykli. Niskie lokanty przypisuje się złączom pomiędzy pierścieniami, następnie wskazanym atomom wodoru (jeżeli są), i finalnie – przedrostkom ‘hydro’.

Przykłady:



$1^1,1^6,2^4,2^5,3^2,3^5$-heksahydro-$1^2,2^3:2^6,3^4$-terpirydyna (PIN)

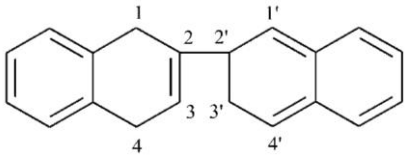
1,2″,4′,5′,5″,6-heksahydro-2,3′:6′,4″-terpirydyna



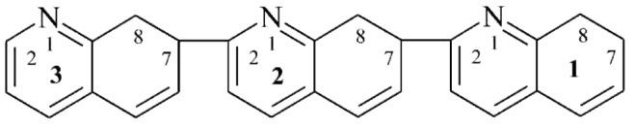
1^4,1^5,2^4,2^5,3^4,3^5-heksahydro-1^1H,2^1H,3^1H-1^2,2^2:2^5,3^3-terazepina (PIN)
4,4′,4″,5,5′,5″-heksahydro-1*H*,1′*H*,1″*H*-2,2′:5′,3″-terazepina

P-31.2.3.3.5.2 Zespoły pierścieni złożone ze związków policyklicznych. Niskie lokanty przypisuje się złączom pomiędzy składnikami, następnie wskazanym atomom wodoru i finalnie – przedrostkom ‘hydro’.

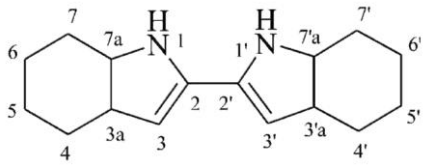
Przykłady:



1,2′,3′,4-tetrahydro-2,2′-binaftalen (PIN)



1^7,1^8,2^7,2^8,3^7,3^8-heksahydro-1^2,2^7:2^2,3^7-terchinolina (PIN)
7,7′,7″,8,8′,8″-heksahydro-2,7′:2′,7″-terchinolina

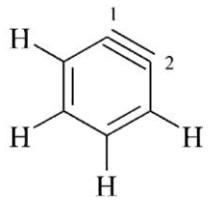


3a,3′a,4,4′,5,5′,6,6′,7,7′,7a,7′a-dodekahydro-1*H*,1′*H*-2,2′-biindol (PIN)

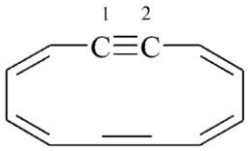
P-31.2.4 Przedrostek ‘dehydro’

P-31.2.4.1 Subtraktywny przedrostek ‘dehydro’ stosuje się do wskazania usunięcia atomów wodoru i powstania wiązań wielokrotnych. W systematycznej nomenklaturze związków organicznych stosuje się go rzadko. Zastosowany do benzenu, daje nazwę ‘1,2-didehydrobenzen’, preferowaną nazwę IUPAC, w miejsce używanej poprzednio nazwy ‘benzyn’. W zastosowaniu do annulenów prowadzi do didehydro[*n*]annulenów – nie są to nazwy preferowane IUPAC, ale są akceptowane w ogólnej nomenklaturze.

Przykłady:



1,2-didehydrobenzen (PIN)
cykloheksa-1,3-dien-5-yn
(poprzednio: 'benzyn')

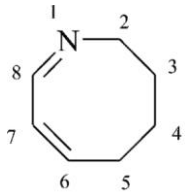


1,2-didehydro[12]annulen
cyklododeka-1,3,5,7,9-pentaen-11-yn (PIN)

P-31.2.4.2 Przedrostek dehydro jest szerzej stosowany w nomenklaturze związków naturalnych, co pozwala zachować semisystematyczne nazwy związków stereomacierzystych (odn. 27)

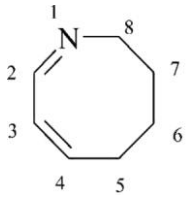
P-31.2.4.3 Nie zaleca się stosowania przedrostków ‘dehydro’ do wskazywania wiązań podwójnych w pierścieniach heterocyklicznych mających nazwy Hantzscha-Widmana. Nazwy tworzy się najczęściej z użyciem przedrostka ‘hydro’, co pokazano w kolejnych przykładach.

Przykład:



2,3,4,5-tetrahydroazocyn (PIN)

nie



1,2,3,4-tetradehydroazokan

P-32 PRZEDROSTKI DLA PODSTAWNIKÓW WYWODZĄCYCH SIĘ Z MACIERZYSTYCH WODORKÓW O ZMODYFIKOWANYM STOPNIU HYDROGENACJI

P-32.0 Wprowadzenie
P-32.1 Podstawniki wywodzące się z macierzystych wodorków z końcówkami ‘en’ i ‘yn’ (‘in’)
P-32.2 Podstawniki wywodzące się z macierzystych wodorków modyfikowanych przedrostkami ‘hydro’
P-32.3 Nazwy zachowane

P-32.0 WPROWADZENIE

Nazwy podstawników pochodzące od nazw odpowiednich nienasyconych związków opisanych w podrozdziale P-31 tworzy się używając odpowiedni przyrostek ‘yl’, ‘yliden’ lub ‘ylidyn’, jak opisano dla tworzenia przedrostków podstawników w podrozdziale P-29. Te nazwy podstawników mogą mieć końcówki ‘en’ lub ‘yn’ i przedrostki ‘hydro’ lub ‘dehydro’ w przypadku związków mancude.

P-32.1 PODSTAWNIKI WYWODZĄCE SIĘ Z MACIERZYSTYCH WODORKÓW O NAZWACH Z KOŃCÓWKAMI ‘EN’ I ‘YN’(‘IN’)

P-32.1.1 Podstawniki wywodzące się z nienasyconych acyklicznych związków nazywa się dwoma sposobami.

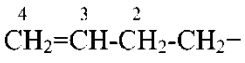
(1) Ponieważ przyrostki mają pierwszeństwo w wyborze niskich lokantów, pozycja (pozycje) wiązań wielokrotnych muszą być wybrane w zgodzie z niskimi lokantami przypisanymi wolnym walencyjnościom. Te wolne walencyjności mogą znajdować się w dowolnej pozycji zmodyfikowanej struktury macierzystej. Dlatego też w przypadku acyklicznych struktur macierzystych należy wymieniać lokanty wszystkich wolnych wiązalności, łącznie z ‘1’.

(2) Nazwy można również tworzyć podstawiając proste podstawniki większymi, w sposób przypominający nasycone przedrostki opisane w podrozdziale P-29.

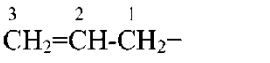
W tych zaleceniach przyjęto największą zmianę w nazywaniu podstawników pochodzących z nienasyconych acyklicznych związków. Jako macierzysty łańcuch wybiera się najdłuższy łańcuch, i jest on preferowany względem liczby i rodzaju wiązań wielokrotnych,

Metoda użyta do tworzenia preferowanych nazw IUPAC, patrz P-57.1.4.1

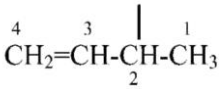
Przykłady:



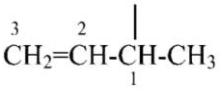
(1) but-3-en-1-yl
(preferowany przedrostek)



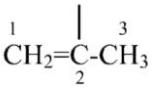
(1) prop-2-en-1-yl
(preferowany przedrostek)



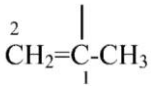
(1) but-3-en-2-yl
(preferowany przedrostek)



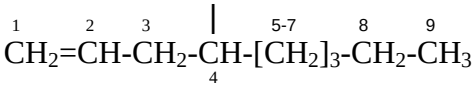
(2) 1-metyloprop-2-en-1-yl



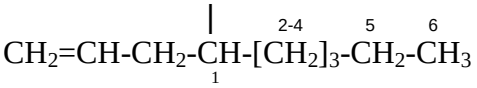
(1) prop-1-en-2-yl
(preferowany przedrostek)
izopropenyl (nazwa zachowana, ale niepodstawialna, patrz P-32.3)



(2) 1-metyloet-1-en-1-yl

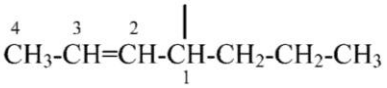


(1) non-1-en-4-yl

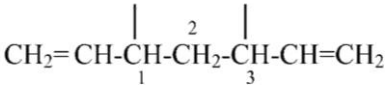


(2) 1-(prop-2-en-1-ylo)heksyl
(nie 1-pentylobut-3-en-1-yl)

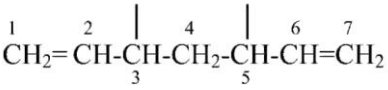
(1) hept-2-en-4-yl
(preferowany przedrostek)



(2) 1-propylobut-2-en-1-yl

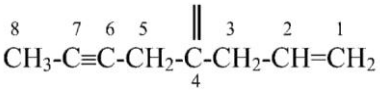


(1)hepta-1,6-dieno-3,5-diyl
(preferowany przedrostek)

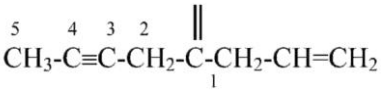


(2) 1,3-dietenylopropano-1,3-diyl

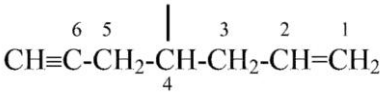
(1) but-3-yn-1-yl (preferowany przedrostek)



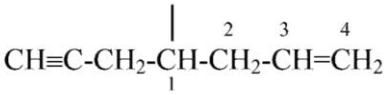
(1) okt-1-en-6-yn-4-yliden
(preferowany przedrostek)



(2) 1-(prop-2-en-1-yl)pent-3-yn-1-yliden

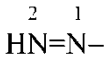


(1) hept-1-en-6-yn-4-yl
(preferowany przedrostek)

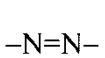


(2) 1-(prop-2-yn-1-ylo)but-3-en-1-yl

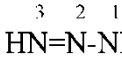
Uwaga: W (1) najniższe lokanty przypisuje się podwójnemu wiązaniu, w (2) podwójne wiązanie znajduje się w głównym łańcuchu.



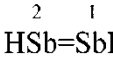
(1) diazenyl
(wstępnie wybrany przedrostek, patrz P-12.2)



(1) diazenodiyl
(wstępnie wybrany przedrostek, patrz P-12.2)



(1) triaz-2-en-1-yl
(wstępnie wybrany przedrostek, patrz P-12.2)

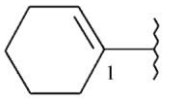


(1) distybenyl
(wstępnie wybrany przedrostek, patrz P-12.2)

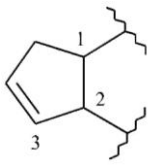
P-32.1.2 Monocykliczne podstawniki

Metodę (1) opisaną w P-31.1.1 stosuje się do nazywania monocyklicznych podstawników.

Przykłady:



cykloheks-1-en-1-yl
(preferowany przedrostek)

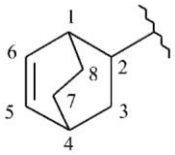


cyklopent-3-eno-1,2-diyl
(preferowany przedrostek)

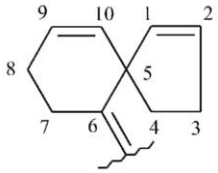
P-32.1.3 Podstawniki wywodzące się z macierzystych wodorków o ustalonym numerowaniu

Najniższe możliwe lokanty przypisuje się, zgodnie z ustalonym numerowaniem macierzystego wodorku, najpierw wolnym wiązalnościom, a następnie miejscom nienasycenia.

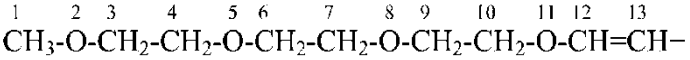
Przykłady:



bicyklo[2.2.2]okt-5-en-2-yl
(preferowany przedrostek)



spiro[4.5]deka-1,9-dien-6-yliden
(preferowany przedrostek)



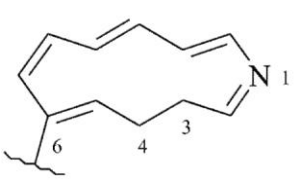
2,5,8,11-tetraoksatridec-12-en-13-yl (preferowany przedrostek)
(nie 3,6,9,12-tetraoksatridec-1-en-1-yl; przyrostek ‘-yl’ dodaje się do nazwy macierzystego wodorku 2,5,8,11-tetraoksatridekanu)

P-32.2 PODSTAWNIKI UTWORZONE Z MACIERZYSTYCH WODORKÓW O NAZWACH ZMODYFIKOWANYCH PRZEDROSTKIEM ‘HYDRO’

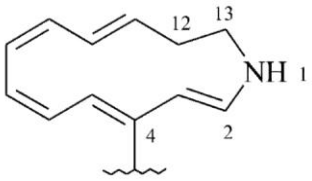
Nazwy częściowo nienasyconych podstawników utworzonych ze związków mancude tworzy się z użyciem przedrostka ‘hydro’. Jeżeli możliwy jest wybór, niskie lokanty przypisuje się zgodnie z porządkiem starszeństwa (patrz P-24.2 i także P-59.1.10) przypisywania możliwie najniższych lokantów niektórym cechom nomenklaturowym. Wskazane i dodane wskazane atomy wodoru muszą być wymienione w nazwach.

P-32.2.1 W heteromonocyklicznych macierzystych wodorkach, o ile istnieje wybór, najniższe możliwe lokanty otrzymują heteroatomy, potem wskazane atomy wodoru, kolejno wolne wiązalności i na końcu przedrostki ‘hydro’.

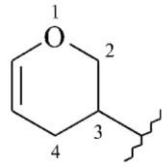
Przykłady:



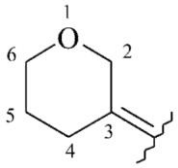
3,4-dihydro-1-aza[12]annulen-6-yl
1-azadodeka-1,5,7,9,11-pentaen-6-yl
(preferowany przedrostek)



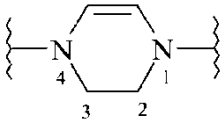
12,13-dihydro-1-aza[13]annulen-4-yl
1-azatrideka-2,4,6,8,10-pentaen-4-yl
(preferowany przedrostek)



3,4-dihydro-2*H*-piran-3-yl
(preferowany przedrostek)



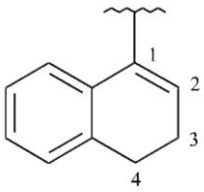
dihydro-2*H*-piran-3(4*H*)-yliden
oksan-3-yliden (preferowany przedrostek)



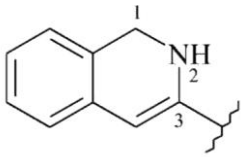
2,3-dihydropirazyno-1,4-diyl (preferowany przedrostek)

P-32.2.2 W policyklicznych związkach mancude, jeżeli istnieje wybór, niższe lokanty przypisuje się najpierw ustalonemu numerowaniu systemu, następnie wskazanemu atomowi wodoru, po nim wolnym wiązalnościom i finalnie przedrostkom ‘hydro’.

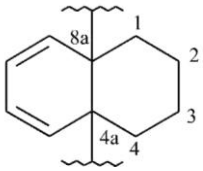
Przykłady:



3,4-dihydronaftalen-1-yl
(preferowany przedrostek)



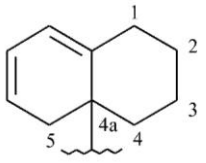
1,2-dihydroizochinolin-3-yl
(preferowany przedrostek)



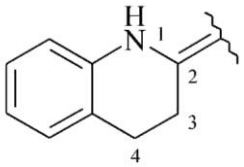
1,2,3,4-tetrahydronaftaleno-4a,8a-diyl (preferowany przedrostek)

P-32.2.3 Gdy stosuje się metodę dodanego wskazanego atomu wodoru (patrz P-58.2.2) i gdy jest możliwy wybór, najpierw niskie lokanty przypisuje się zgodnie z ustalonym numerowaniem systemu, następnie wskazanym atomom wodoru, potem przyrostkom dla wolnych wiązalności, dodanych atomów wodoru i na końcu, przedrostkom 'hydro' (patrz P-14.4).

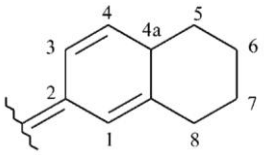
Przykłady:



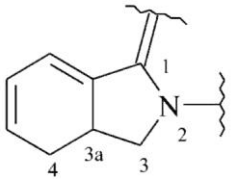
1,3,4,5-tetrahydronaftalen-4a(2*H*)-yl
(preferowany przedrostek)



3,4-dihydrochinolin-2-(1*H*)-yliden
(preferowany przedrostek)



5,6,7,8-tetrahydronaftalen-2(4a*H*)-yliden
(preferowany przedrostek)



3a,4-dihydro-1*H*-izoindol-2(3*H*)-1-yl-1-yliden
(preferowany przedrostek)

P-32.3 ZACHOWANE NAZWY PODSTAWNIKÓW WYWODZĄCYCH SIĘ Z NIENASYCONYCH ACYKLICZNYCH WODORKÓW MACIERZYSTYCH

Nazwy winyl dla CH_2=CH-; winyliden dla CH_2=C=; allil dla $\overset{3}{C}H_2=\overset{2}{C}H-\overset{1}{C}H_2$-; alliliden dla $\overset{3}{C}H_2=\overset{2}{C}H-\overset{1}{C}H=$ i allilidyn dla $\overset{3}{C}H_2=\overset{2}{C}H-\overset{1}{C}\equiv$ są zachowane ale tylko w ogólnej nomenklaturze. Dozwolone jest podstawianie, ale nie grupami alkilowymi ani innymi przedłużającymi łańcuch węglowy ani też grupami charakterystycznymi wskazywanymi przyrostkami. Preferowanymi nazwami IUPAC są nazwy systematyczne, etenyl, etenyliden, prop-2-en-1-yl, prop-2-en-1-yliden i prop-2-en-1-ylidyn.

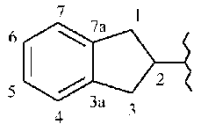
Zachowuje się nazwę izopropenyl dla $CH_2=C(CH_3)$- ale nie jest ona preferowaną nazwą IUPAC. Jest akceptowalna do ogólnego użytku, ale bez możliwości podstawiania. Preferowaną nazwą IUPAC jest prop-1-en-2-yl.

Nazwa styryl dla C_6H_5-CH=CH- jest zachowana tylko w ogólnej nomenklaturze, podstawienie jest dozwolone tylko w pierścieniu. Preferowaną nazwą IUPAC jest 2-fenyloeten-1-yl.

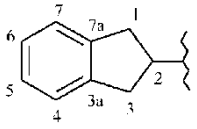
P-32.4 ZACHOWANE NAZWY PODSTAWNIKÓW UTWORZONYCH Z CZĘŚCIOWO NASYCONYCH POLICYKLICZNYCH MACIERZYSTYCH WODORKÓW

Przedrostki w Tabeli 3.2 są zachowane, ale tylko w ogólnej nomenklaturze i mogą być w pełni podstawiane; preferowane przedrostki tworzy się systematycznie.

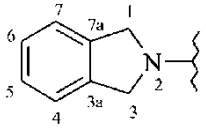
Tabela 3.2 Zachowane nazwy podstawników utworzonych z częściowo nasyconych policyklicznych wodorków macierzystych



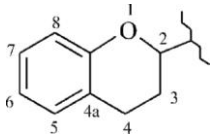
indan-2-yl
(także izomery 1-, 4- i 5-)
2,3-dihydro-1*H*-inden-2-yl (preferowany przedrostek)
(także izomery 1-, 4- i 5-)



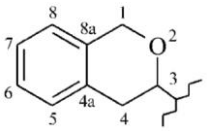
indolin-2-yl (także izomery 1-, 3-, 4-, 5-, 6- i 7-)
2,3-dihydro-1*H*-indol-2-il (preferowany przedrostek), (także izomery 1-, 3-, 4-, 5-, 6- i 7-)



izoindolin-2-yl (także izomery 1-, 4- i 5-)
2,3-dihydro-1*H*-izoindol-2-il (preferowany przedrostek), (także izomery 1-, 4- i 5-)



chroman-2-yl (także izomery 3-, 4-, 5-, 6-, 7- i 8-)
3,4-dihydro-2*H*-chromen-2-yl (także izomery 3-, 4-, 5-, 6-, 7- i 8-)
3,4-dihydro-2*H*-1-benzopiran-2-yl (także izomery 3-, 4-, 5-, 6-, 7- i 8-)
(preferowane przedrostki)



izochroman-3-yl (także izomery 1-, 4-, 5-, 6-, 7- i 8-)
3,4-dihydro-1*H*-izochromen-3-yl (także izomery 1-, 4-, 5-, 6-, 7- i 8-)
3,4-dihydro-1*H*-2-benzopiran-3-yl (także izomery 1-, 4-, 5-, 6-, 7- i 8-)
(preferowane przedrostki)

tiochroman-2-yl (S zamiast O) także izomery 3-, 4-, 5-, 6-, 7- i 8-)
3,4-dihydro-2*H*-tiochromen-2-yl (także izomery 3-, 4-, 5-, 6-, 7- i 8-)
3,4-dihydro-2*H*-1-benzotiopiran-2-yl (także izomery 3-, 4-, 5-, 6-, 7- i 8-)
(preferowane przedrostki)

izotiochroman-3-yl (S zamiast O) także izomery 1-, 4-, 5-, 6-, 7- i 8-)
3,4-dihydro-1*H*-izotiochromen-3-yl (także izomery 1-, 4-, 5-, 6-, 7- i 8-)
3,4-dihydro-1*H*-2-benzotiopiran-3-yl (także izomery 1-, 4-, 5-, 6-, 7- i 8-)
(preferowane przedrostki)

selenochroman-2-yl (Se zamiast O) (także izomery 3-, 4-, 5-, 6-, 7- i 8-)
3,4-dihydro-2*H*-selenochromen-2-yl (także izomery 3-, 4-, 5-, 6-, 7- i 8-)
3,4-dihydro-2*H*-1-benzoselenopiran-2-yl (także izomery 3-, 4-, 5-, 6-, 7- i 8-)
(preferowane przedrostki)

izoselenochroman-3-yl (Se zamiast O) (także izomery 1-, 4-, 5-, 6-, 7- i 8-)
3,4-dihydro-1*H*-izoselenochromen-3-yl (także izomery 1-, 4-, 5-, 6-, 7- i 8-)
3,4-dihydro-1*H*-2-benzoselenopiran-3-yl (także izomery 1-, 4-, 5-, 6-, 7- i 8-)
(preferowane przedrostki)

tellurochroman-2-yl (Te zamiast O) (także izomery 3-, 4-, 5-, 6-, 7- i 8-)
3,4-dihydro-2*H*-tellurochromen-2-yl (także izomery 3-, 4-, 5-, 6-, 7- i 8-)
3,4-dihydro-2*H*-1-benzotelluropiran-2-yl (także izomery 3-, 4-, 5-, 6-, 7- i 8-)
(preferowane przedrostki)

izotellurochroman-3-yl (Te zamiast O) (także izomery 1-, 4-, 5-, 6-, 7- i 8-)
3,4-dihydro-1*H*-izotellurochromen-3-yl (także izomery 1-, 4-, 5-, 6-, 7- i 8-)
3,4-dihydro-1*H*-2-benzotelluropiran-3-yl (także izomery 1-, 4-, 5-, 6-, 7- i 8-)
(preferowane przedrostki)

P-33 PRZYROSTKI

P-33.0 Wprowadzenie
P-33.1 Definicje
P-33.2 Przyrostki funkcyjne
P-33.4 Przyrostki skumulowane

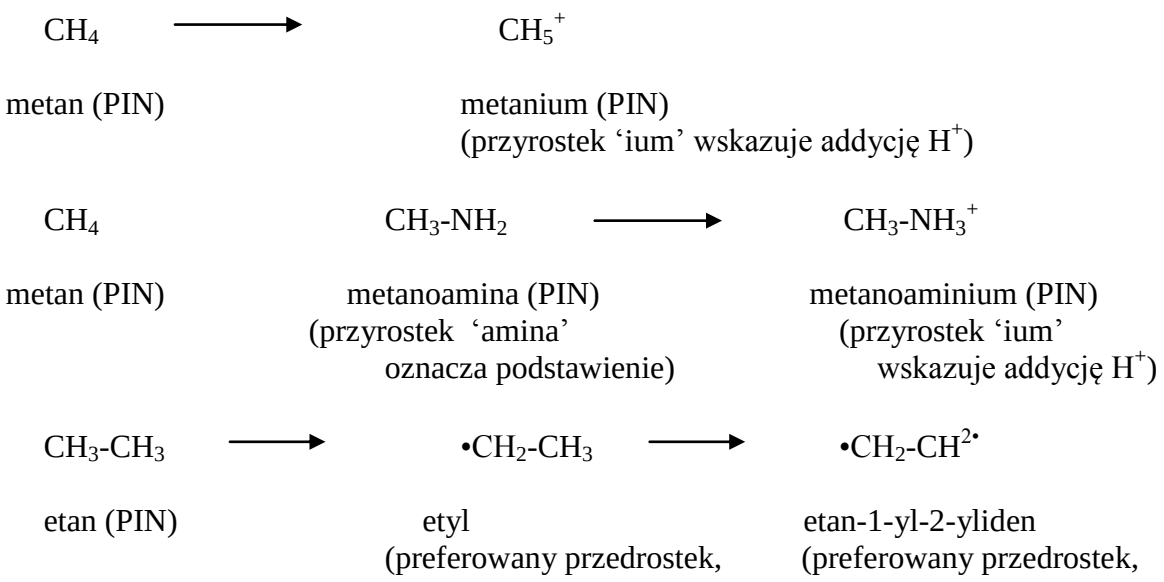
P-33.0 WPROWADZENIE

W tym podrozdziale podane są nazwy podstawników reprezentujących grupy charakterystyczne wyrażane przyrostkami. W istocie są to grupy charakterystyczne mające wolne wiązalności na atomach takich jak chalkogeny (O, S, Se, Te) i azot. Ta idea została rozszerzona na atomy węgla połączone z halogenami, chalkogenami i azotem, takie jak –CO-Cl, -CO-OH, -CS-SH, -CHO, -CN. Rodniki i jony wskazuje się przyrostkami w nomenklaturze podstawnikowej, ale nie uważa się ich za grupy charakterystyczne.

P-33.1 DEFINICJE

Przyrostki dzieli się na ‘przyrostki funkcyjne’ reprezentujące grupy charakterystyczne i ‘przyrostki skumulowane’ stosowane do oznaczenia rodników i jonów. Przyrostki wskazujące grupy charakterystyczne dzieli się na ‘przyrostki funkcyjne’ i ‘przyrostki skumulowane’. Przyrostki funkcyjne (P-32.2) wskazują grupy charakterystyczne; są one ekskluzywne, ponieważ tylko jeden taki przyrostek może zostać dodany do nazwy reprezentując grupę charakterystyczną lub funkcję. Z drugiej strony przyrostki wskazujące rodniki i jony można używać w połączeniu ze sobą i również w połączeniu z przedrostkami funkcyjnymi. (Patrz rozdział P-7). W nazwach przyrostki funkcyjne są zawsze dołączone do nazwy macierzystego wodorku, modyfikowanej lub nie końcówkami ‘-en’ i ‘-yn’ (‘in’). Przyrostki skumulowane (patrz P-33.3) mogą być dołączone do nazwy macierzystego wodorku, modyfikowanej lub nie końcówkami ‘-en’ i ‘–yn’ (‘-in’); ale jeżeli obecne są już funkcyjne przyrostki, przyrostki skumulowane dołącza się do nich.

Przykłady:



przyrostek ‘yl’ wskazuje utratę jednego atomu wodoru)

przyrostek ‘yliden’ wskazuje utratę dwóch atomów wodoru)

P-33.2 PRZYROSTKI FUNKCYJNE

P-33.2.1 Podstawowe przyrostki funkcyjne

Podstawowe przyrostki funkcyjne są zbudowane tylko z atomów tlenu i/lub azotu, z lub bez związania z atomami węgla, jak w przypadku kwasów karboksylowych, amidów, nitryli i aldehydów, a także z atomami siarki, do wskazania kwasów sulfonowych i sulfinowych i odpowiadających im amidów i hydrazydów. Są one podane w Tabeli 3.3.

Do listy podstawowych przyrostków dodano ‘peroksol’ dla –OOH. Jego modyfikacja przez zamianę funkcji prowadzi do przyrostków ‘-*OS*-tioperoksol’ dla –OSH, i –‘*SO*-tioperoksol’ dla –SOH. Przyrostek ‘kwas sulfenowy’dla –SOH został usunięty w Przewodniku z 1993 roku)

Tabela 3.3 Podstawowe preferowane i wstępnie wybrane przyrostki, w malejącym porządku starszeństwa, wymieniane jako główna grupa charakterystyczna (preferowane są przyrostki zawierające atom węgla)

	Wzór	Podstawowy przyrostek
(1)	-CO-OH	kwas karboksylowy (preferowany przyrostek)
(2)	-(C)O-OH	kwas –owy (preferowany przyrostek)
(3)	-SO_2-OH	kwas sulfonowy (przyrostek wstępnie wybrany)
(4)	-SO-OH	kwas sulfinowy (przyrostek wstępnie wybrany)
(5)	-CO-NH_2	karboksyamid (preferowany przyrostek)
(6)	-(C)O-NH_2	amid (preferowany przyrostek)
(7)	-CO-NNH_2	karbohydrazyd (preferowany przyrostek)
(8)	-(C)O-NNH_2	hydrazyd (preferowany przyrostek)
(9)	-CN	karbonitryl (preferowany przyrostek)
(10)	-(C)N	nitryl (preferowany przyrostek)
(11)	-CHO	karboaldehyd (preferowany przyrostek)
(12)	-(C)HO	al (preferowany przyrostek)

(13)	=O	on (przyrostek wstępnie wybrany)
(14)	-OH	ol (przyrostek wstępnie wybrany)
(15)	-OOH	peroksol (przyrostek wstępnie wybrany)
(16)	$-NH_2$	amina (przyrostek wstępnie wybrany)
(17)	=NH	imina (przyrostek wstępnie wybrany)

P-33.2.2 Pochodne preferowanych i wstępnie wybranych przyrostków

Pochodne przyrostków tworzy się w różny sposób modyfikując podstawowe przyrostki z Tabeli 3.3. Podstawowe przyrostki zawierające atom węgla modyfikuje się zamianą funkcji stosując wrostki wskazujące zastąpienie atomów tlenu przez –OO-, -S-, =S, -Se-, =Se, -Te-, =Te, =NH i =NNH, jak pokazano w P-15.5.

Przykłady:

-CO-OH	kwas karboksylowy (preferowany przyrostek)
-C(O)-OOH	kwas karboperoksowy (preferowany przyrostek)
-C(O)-SH	*S*-kwas karbotiowy ((preferowany przyrostek)
-C(Se)-OH	*O*-kwas karboselenowy (preferowany przyrostek)
-C(=NH)-OH	kwas karboksyimidowy (preferowany przyrostek)
$-C(=NNH_2)-OH$	kwas karbohydrazonowy (preferowany przyrostek)
-C(=NH)-SH	kwas karboksyimidotiowy (preferowany przyrostek)
$-CO-NH_2$	karboksyamid (preferowany przyrostek)
$-C(Te)-NH_2$	karbotelluroamid (preferowany przyrostek)
$-CO-NHNH_2$	karbohydrazyd (preferowany przyrostek)
$-C(S)-NHNH_2$	karbotiohydrazyd (preferowany przyrostek)
-CHO	karboaldehyd (preferowany przyrostek)
-CHS	karbotioaldehyd (preferowany przyrostek)

(2) Podstawowe przyrostki zawierające ukryty atom węgla modyfikuje się zamianą funkcji stosując przedrostki wskazujące zamianę atomów tlenu przez –OO-, -S-, =S, -Se-, =Se, -Te-, =Te, =NH i $=NNH_2$ jak pokazano w P-15.5.

Przykłady:

-(C)O-OH	kwas owy (preferowany przyrostek)
-(C)O-OOH	kwas peroksowy (preferowany przyrostek)

-(C)O-SH	*S*-kwas tiowy (preferowany przyrostek)
-(C)Te-OH	*O*-kwas tellurowy (preferowany przyrostek)
-(C)(=NH)-OH	kwas imidowy (preferowany przyrostek)
-(C)(=NNH_2)-OH	kwas hydrazonowy (preferowany przyrostek)
-(C)(=NH)-SeH	kwas imidoselenowy (preferowany przyrostek)
-(C)O-NH_2	amid (preferowany przyrostek)
-(C)S-NH_2	tioamid (preferowany przyrostek)
-(C)O-$NHNH_2$	hydrazyd (preferowany przyrostek)
-(C)S-$NHNH_2$	tiohydrazyd (preferowany przyrostek)
-(C)HO	al (preferowany przyrostek)
-(C)HSe	selenal (preferowany przyrostek)

(3) Podstawowe przedrostki nie zawierające atomów węgla modyfikuje się nomenklaturą zamienną funkcji przy użyciu przedrostków wskazujących zastąpienie atomów tlenu innymi atomami chalkogenów.

Przykłady:

=O	on (preferowany przyrostek)
=S	tion (preferowany przyrostek)
=Se	selon (preferowany przyrostek) (nie selenon)
=Te	tellon (preferowany przyrostek) (nie telluron)
-OH	ol (wstępnie wybrany przyrostek)
-SH	tiol (wstępnie wybrany przyrostek)
-OOH	peroksol (wstępnie wybrany przyrostek)
-OSH	*OS*-tioperoksol (wstępnie wybrany przyrostek)

(4) Rdzeń ‘sulf’ zastępuje się rdzeniami ‘selen’ i ‘tellur’ tworząc selenowe i tellurowe analogi kwasów sulfonowych i sulfinowych.

Przykłady:

-SO_2-OH	kwas sulfonowy (wstępnie wybrany przyrostek)
-SO-OH	kwas sulfinowy (wstępnie wybrany przyrostek)
-SeO_2-OH	kwas selenonowy (wstępnie wybrany przyrostek)
-TeO-OH	kwas tellurynowy (wstępnie wybrany przyrostek)

(5) Przyrostki w rodzaju ‘kwas sulfonowy’ i analogi modyfikuje się zamianą funkcyjną stosując wrostki wskazujące zamianę atomów tlenu przez –OO-, -S-, =S, -Se-, =Se, -Te-, =Te, =NH i $=NNH_2$ jak pokazano w P-15.5.

Przykłady:

$-SO_2-OH$	kwas sulfonowy (wstępnie wybrany przyrostek)
$-SO_2-OOH$	kwas sulfonoperoksowy (wstępnie wybrany przyrostek)
$-S(=NNH_2)-OH$	kwas sulfonodihydrazonowy (wstępnie wybrany przyrostek)
-SeO-OH	kwas seleninowy (wstępnie wybrany przyrostek)
-SeO-SH	kwas seleninotiowy (wstępnie wybrany przyrostek)
$-TeO_2-OH$	kwas telluronowy (wstępnie wybrany przyrostek)
-Te(O)(=NH)-OH	kwas tellurynoimidowy (wstępnie wybrany przyrostek)
-SO-OH	kwas sulfinowy (wstępnie wybrany przyrostek)
$-S(=NNH_2)-OH$	kwas sulfinohydrazonowy (wstępnie wybrany przyrostek)

(6) Nazwy amidów i hydrazydów tworzy się zamieniając końcówkę przyrostka ‘kwas owy’ na ‘amid’ lub ‘hydrazyd’.

Przykłady:

-(C)(=NH)-OH	kwas imidowy (preferowany przyrostek)
$-(C)(=NH)-NH_2$	imidoamid (preferowany przyrostek)
-C(=NH)-OH	kwas karboksyimidowy (preferowany przyrostek)
$-C(=NH)-NH_2$	karboksyimidoamid (preferowany przyrostek)
$-(C)(=NHNH_2)-OH$	kwas hydrazonowy (preferowany przyrostek)
$-(C)(=NHNH_2)-NHNH_2$	hydrazonohydrazyd (preferowany przyrostek)
$-SO_2-OH$	kwas sulfonowy (wstępnie wybrany przyrostek)
$-SO_2-NH_2$	sulfonoamid (wstępnie wybrany przyrostek)
-SeO-OH	kwas seleninowy ((wstępnie wybrany przyrostek)
$-SeO-NHNH_2$	seleninohydrazyd (wstępnie wybrany przyrostek)

(7) Przyrostków z grupami $–NH_2$ i =NH podstawionymi grupą –OH nie nazywa się już preferowanymi nazwami ‘kwasem karbohydroksyamowym’ i ‘kwasem karbohydroksymowym’. Preferowanymi nazwami IUPAC są teraz *N*-hydroksy pochodne amidów i kwasów amidowych.

Przykłady:

CH_3-CH_2-CO-NH_2	CH_3-CH_2-CO-NH-OH
propanoamid (PIN)	*N*-hydroksypropanoamid (PIN) kwas propanohydroksyamowy
CH_3-CH_2-C(=NH)-OH	CH_3-CH_2-C(=N-OH)-OH
kwas propanoimidowy (PIN)	kwas *N*-hydroksypropanoimidowy (PIN) kwas propanohydroksymowy

P-33.3 PRZYROSTKI SKUMULOWANE

Przyrostki używane do wskazywania rodników i centrów jonowych w strukturach macierzystych są podane w Tabeli 3.4. Ułożone są one w malejącym porządku starszeństwa, rodniki >aniony >kationy. Przyrostki te dodaje się, w zwykły sposób, do nazwy macierzystego wodorku, lub do przyrostków wskazujących grupy charakterystyczne. Nazwy rodników tworzy się tak samo jak nazwy podstawników (patrz P-29.2), z wyjątkiem di- i triwalencyjnych rodników skupionych na jednym atomie, które nazywa się przyrostkami ‘yliden’ i ‘ylidyn’, ale już nie ‘diyl’ lub ‘triyl’.

Uwaga: ‘en’ i ‘yn’(‘in’) uważa się za końcówki, nie przyrostki. Są one skumulowanymi końcówkami.

Tabela 3.4 Afiksy dla rodnikowych i jonowych centrów w strukturach macierzystych

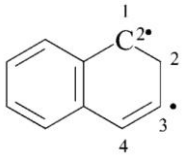
	Operacja	**Przyrostek**	**Końcówka**
Rodniki	Utrata $H^{\bullet}$	-yl	
	Utrata $2H^{\bullet}$		
	z jednego atomu	-yliden	
	z różnych atomów	-diyl	
	Utrata $3H^{\bullet}$		
	z jednego atomu	-ylidyn	
	z różnych atomów	-triyl	
		-ylyliden	
		etc.	
Aniony	Utrata H^{+}	-id	-an, -ian
	Addycja H^{-}	-uid	
Kationy	Utrata H^{-}	-ylium	
	Addycja H^{+}	-ium	

Przykłady:

CH_3-CH_3	CH_3-$CH_2^{\bullet}$	$^{-}\overset{2}{C}H_2$-$\overset{1}{C}H_2^{\bullet}$
etan (PIN)	etyl (PIN)	etan-2-id-1-yl (preferowany przedrostek)
CH_3-NH_2	CH_3-NH_3^{+}	CH_3-NH_2^{+}-
metanoamina (PIN)	metanoaminium (PIN)	metanoaminiumyl (preferowany przedrostek)

CH_3-$NH^{\bullet}$

metanoaminyl (PIN)



naftalen-3-yl-1(2*H*)-yliden (PIN)

P-34 ZWIĄZKI O MACIERZYSTYCH FUNKCJACH

P-34.0 Wprowadzenie
P-34.1 Związki o macierzystych funkcjach
P-34.2 Podstawniki związane ze związkami o macierzystych funkcjach
P-34.3 Struktury macierzyste i odpowiadające im przedrostki

P-34.0 WPROWADZENIE

W chemii organicznej używa się wielu zwyczajowych i semi-systematycznych nazw. W miarę coraz intensywniejszych działań na rzecz nazw systematycznych, liczba zachowanych nazw (zwyczajowych i semi-systematycznych) była stopniowo zmniejszana w Zaleceniach z 1979 r. (odn.1) i ponownie w przewodniku z 1993 r. (odn.2) . Związki o macierzystych funkcjach zdefiniowano i dyskutuje się w P-15.1.2 opisującym nomenklaturę podstawnikową. Ten podrozdział podaje kodyfikowaną w 2005 r. listę związków o macierzystych funkcjach utworzoną w 1993 roku i klasyfikowaną jako preferowane nazwy IUPAC lub nazwy, które mogą być używane tylko w ogólnej lub wyspecjalizowanej (patrz rozdział P-10) nomenklaturze.

W kolejnym podrozdziale, P-34.1, podano listę rekomendowanych nazw IUPAC. Nazwy rekomendowane dla ogólnej i wyspecjalizowanej nomenklatury podane są w P-34.2, rozdziałach P-6 i P-10 wspólnie z systematycznymi nazwami podstawnikowymi dla różnych klas związków. Nazwy podstawników omawiane są w P-34.3, rozdziale P-6 i rozdziale P-10.

P-34.1 ZACHOWANE NAZWY ZWIĄZKÓW O MACIERZYSTYCH FUNKCJACH

Zachowane nazwy następujących związków o macierzystych funkcjach używa się jako preferowane nazwy IUPAC a także w nomenklaturze ogólnej i wyspecjalizowanej. Listy w P-34.1.1 i P-34.1.2 są wyczerpujące jeśli chodzi o preferowane nazwy IUPAC; więcej zachowanych nazw związków o macierzystych funkcjach zalecanych do użycia w ogólnej i wyspecjalizowanej

nomenklaturze podano w P-34.1.3. Dla każdego związku określono typ podstawienia (dozwolone czy nie), zgodnie z ogólną metodologią podaną w P-34.1.2.

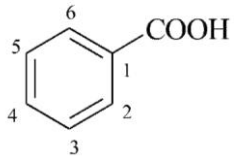
P-34.1.1 Organiczne związki o macierzystych funkcjach (ułożone według klas grup charakterystycznych)
P-34.1.2 Organiczne związki o macierzystych funkcjach (ułożone alfabetycznie)
P-34.1.3 Organiczne związki o macierzystych funkcjach dla ogólnej i wyspecjalizowanej nomenklatury
P-34.1.4 Nieorganiczne związki o macierzystych funkcjach

P-34.1.1 Organiczne związki o macierzystych funkcjach (ułożone według klas grup charakterystycznych)

P-34.1.1.1 Kwasy

CH_3-COOH

kwas octowy (PIN)
(podstawienie dozwolone, patrz P-65.1.1.1)
kwas etanowy



kwas benzoesowy (PIN)
(podstawienie dozwolone, patrz P-65.1.1.1)
kwas benzenokarboksylowy

H_2N-COOH

kwas karbamowy (PIN)
(podstawienie dozwolone, patrz P-65.1.1.1)
kwas karbonoamidowy

HO-CO-OH

kwas karbonowy (PIN)
(patrz P-65.2)
kwas węglowy

NC-OH

kwas cyjanowy (PIN)
kwas karbononitrydowy
(patrz P-65.2.2)

H-COOH

kwas mrówkowy (PIN)
(ograniczone podstawienie, patrz P-65.1.8)
kwas metanowy

HOOC-COOH

kwas szczawiowy (PIN)
(patrz P-65.1.1.1)
kwas etanodiowy

H_2N-CO-COOH

kwas oksamowy (PIN)
(podstawienie dozwolone, patrz P-65.1.1.1)
kwas amino(okso)octowy

H_2N-C(=NH)-OH

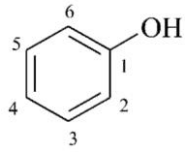
kwas karbamoimidowy (PIN; patrz P-65.2.1.3)
kwas karbonoamidoimidowy

P-34.1.1.2 Związki karbonylowe

OHC-CHO

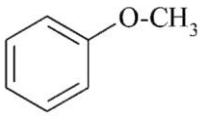
oksaldehyd (PIN; patrz P-66.6.1.2)
etanodial
glioksal (patrz P-66.6.1.2; dozwolone ograniczone podstawienie: patrz P-65.1.8.2)

P-34.1.1.3 Związki hydroksylowe



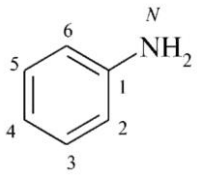
fenol (PIN)
(podstawienie dozwolone; P-65.1.1.1)
benzenol

P-34.1.1.4 Etery



anizol (PIN)
(bez podstawienia dla PINów; w ogólnej nomenklaturze podstawienie dozwolone w pierścieniu i grupie α-metoksylowej i tylko grupami wymienionymi w P-15.1.8.2; patrz także P-63.2.3)
metoksybenzen

P-34.1.1.5 Związki azotowe



anilina (PIN); pełne podstawienie, patrz P-62.2.1.1.1)
benzenoamina

$H_2N\overset{5}{-}N\overset{4}{=}C\overset{3}{H}-N\overset{2}{=}N\overset{1}{H}$

formazan (PIN)
(patrz P-68.3.1.3.5)
(hydrazynolidenometylo)diazen

$H_2\overset{3}{N}-C(=\overset{2}{N}H)-\overset{1}{N}H_2$

guanidyna (PIN)
(podstawienie dozwolone; patrz P-66.4.1.2.1)
diamid karbonoimidowy

H_2N-OH hydroksyloamina (nazwa wstępnie wybrana; patrz P-68.3.1.1.1)

$H_2\overset{N'}{N}-\overset{2}{C}O-\overset{1}{C}O-\overset{N}{N}H_2$

oksamid (PIN)
(podstawienie dozwolone; patrz P-66.1.1.1.2.1)
diamid szczawiowy

$H_2\overset{3}{N}-\overset{2}{C}O-\overset{1}{N}H_2$

mocznik (PIN)
(podstawienie dozwolone; patrz P-66.1.1.1.2.1)
diamid karbonowy

P-34.1.2 Organiczne związki o macierzystych funkcjach (ułożone alfabetycznie)

Zachowane nazwy (PIN)	**Alternatywne nazwy**
anilina (podstawienie dozwolone; patrz P-65.1.1.1)	benzenoamina
anizol (bez podstawienia dla PINów; w ogólnej nomenklaturze podstawienie dozwolone w pierścieniu i grupie α-metoksylowej i tylko grupami wymienionymi w P-15.1.8.2; patrz także P-63.2.3)	metoksybenzen
fenol (podstawienie dozwolone; patrz P-63.1.1.1)	benzenol
formazan (podstawienie dozwolone; patrz P-68.3.1.3.5)	(hydrazylidenometylo)diazen
guanidyna (podstawienie dozwolone; patrz P-66.4.1.2.1)	karbonoimidoil
hydroksyloamina (wyjątkowe podstawienie, patrz P-68.3.1.1.1)	
mocznik (podstawienie dozwolone, patrz P-66.1.6.1.1)	karbonowy diamid
oksamid (podstawienie dozwolone; patrz P-66.1.1.1.1.2)	szczawiowy diamid
oksaldehyd (bez podstawienia, patrz P-66.6.1.2)	etanodial glioksal (patrz P-66.6.1.2; (dozwolone ograniczone podstawienie, patrz P-65.1.8.2)
kwas benzoesowy (podstawienie dozwolone, patrz 65.1.1.1)	kwas benzenokarboksylowy
kwas cyjanowy (patrz P-65.2.2)	kwas karbononitrydowy
kwas karbamowy (podstawienie dozwolone, patrz 65.2.1.1)	kwas karbonoamidowy
kwas karbamoimidowy (podstawienie dozwolone, patrz P-65.2.1.3)	
kwas karbonowy (węglowy) (patrz P-65.2)	
kwas mrówkowy (dozwolone ograniczone podstawienie; patrz P-65.1.8)	kwas metanowy
kwas octowy (podstawienie dozwolone, patrz P-65.1.1.1)	kwas etanowy
kwas oksamowy (podstawienie dozwolone, patrz P-65.1.6.1.1)	
kwas szczawiowy (patrz P-65.1.1.1)	kwas etanodiowy

P-34.1.3 Organiczne związki o macierzystych funkcjach dla ogólnej i wyspecjalizowanej nomenklatury

Związki o macierzystych funkcjach zalecane w regułach z 1979 roku (odn.1) i w Przewodniku z 1993 roku (odn.2) mogą być używane w ogólnej nomenklaturze organicznej. Są również używane w nomenklaturze biochemicznej, w nomenklaturze polimerów i nomenklaturze związków naturalnych. Ich wzory i nazwy podane są w rozdziałach P-6 i P-10. Opisane są różne klasy: związki hydroksylowe (patrz P-65) i etery (patrz P-63), związki karbonylowe (patrz P-64) kwasy

karboksylowe (patrz P-65), aminy (patrz P-62), związki siarki (patrz P-66.1.1.4.2) i kwasy sulfoamowe (patrz P-67.1.2.4.1.1), acykliczne związki poliazotowe (patrz P-66.1.6, P-68.3.1.3) i związki halogenowe (patrz P-68.5).

Struktury alkaloidów, steroidów, terpenów i podobnych związków podane są w Załączniku 3.

P-34.1.4 Nieorganiczne związki o macierzystych funkcjach

Te związki opisane są w P-67.1.1 i P-67.2.1.

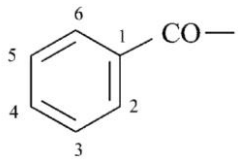
P-34.2 PODSTAWNIKI UTWORZONE ZE ZWIĄZKÓW O MACIERZYSTYCH FUNKCJACH

P-34.2.1 Organiczne podstawniki (pogrupowane według klas)

P-34.2.1.1 Grupy acylowe

CH_3-CO-

acetyl (preferowany przedrostek)
(dozwolone pełne podstawienie, ale nie wolno przedłużyć łańcucha węglowego; patrz P-65.1.7.2.1)
etanoil
1-oksoetyl



benzoil (preferowany przedrostek)
(pełne podstawienie P-65.1.7.2.1)
fenylokarbonyl

H_2N-C(=NH)-

karbamoimidoil (preferowany przedrostek)
(pełne podstawienie, patrz P-65.2.1.5)
aminokarbonoimidoil

H_2N-CO-

karbamoil (preferowany przedrostek)
(pełne podstawienie, patrz P-65.2.1.5)
aminokarbonyl

-CO-

karbonyl (preferowany przedrostek)
(patrz P-65.2.1.5)

H_2N-CO-CO-

oksamoil (preferowany przedrostek)
(pełne podstawienie; patrz P-66.1.4.1.2)

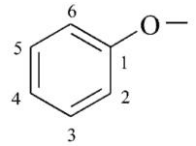
-H-CO-

formyl (preferowany przedrostek)
(ograniczone podstawienie; patrz P-65.1.7.2.1)
oksometyl

-CO-CO-

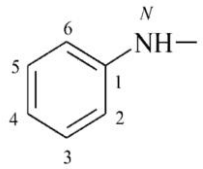
oksalil (preferowany przedrostek; patrz P-65.1.7.2.1)
etanodioil
dioksoetanodiyl

P-34.2.1.2 Podstawniki utworzone z nazw związków hydroksylowych

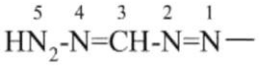


fenoksy (preferowany przedrostek)
(pełne podstawienie, patrz P-63.2.2.2)

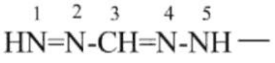
P-34.2.1.3 Nazwy podstawników zawierających azot



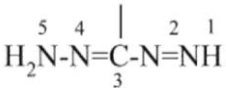
anilino (preferowany przedrostek)
(pełne podstawienie, patrz P-62.2.1.1.1)
fenyloamino



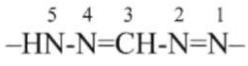
formazan-1-yl (preferowany przedrostek)
(pełne podstawienie; patrz P-68.3.1.3.5.2)
(hydrazylidenometylo)diazenyl



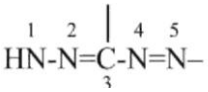
formazan-5-yl (preferowany przedrostek)
(pełne podstawienie; patrz P-68.3.1.3.5.2)
(diazenylometylideno)hydrazynyl



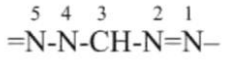
formazan-3-yl (preferowany przedrostek)
(pełne podstawienie; patrz P-68.3.1.3.5.2)
diazenylo(hydrazylideno)metyl



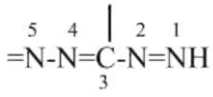
formazan-1,5-diyl (preferowany przedrostek)
(pełne podstawienie; patrz P-68.3.1.3.5.2)



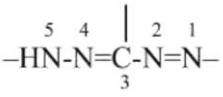
formazano-3,5-diyl (preferowany przedrostek)
(pełne podstawienie; patrz P-68.3.1.3.5.2)



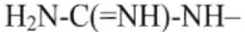
formazan-1-yl-5-yliden (preferowany przedrostek)
(pełne podstawienie; patrz P-68.3.1.3.5.2



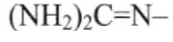
formazan-3-yl-5-yliden (preferowany przedrostek)
(pełne podstawienie; patrz P-68.3.1.3.5.2)



formazano-1,3,5-triyl (preferowany przedrostek) (pełne podstawienie; patrz P-68.3.1.3.5.2)



karbamoimidoiloamino (preferowany przedrostek)
(patrz P-66.4.1.2.1.3)
(nie guanidyno)



(diaminometylideno)amino
(preferowany przedrostek; patrz P-66.4.1.2.1.3)

H_2N-CO-CO-NH-	-NH-CO-CO-NH-
oksamoiloamino (preferowany przedrostek) (patrz P-66.1.1.4.5.1)	oksalilobis(azanodiylo) (preferowany przedrostek; patrz P-66.1.1.4.5.1)
H_2N-CO-NH–	–HN-CO-NH–
karbamoiloamino (preferowany przedrostek) (patrz P-66.1.6.1.1.3) (nie ureido)	karbonylobis(azanodiylo) (preferowany przedrostek) (patrz P-66.1.6.1.1.3)

P-34.2.2
Organiczne podstawniki (alfabetycznie)

Preferowane przedrostki	Alternatywne nazwy
acetyl (dozwolone podstawienie, ale bez przedłużania łańcucha węglowego, patrz P-65.1.7.2.1	etanoil
anilino (bez podstawienia, patrz P-62.2.1.1.1)	(fenyloamino)
benzoil (dozwolone podstawienie; patrz P-65.1.7.2.1)	benzenokarbonyl (fenylokarbonyl)
(diaminometylideno)amino (patrz P-66.4.1.2.1.3)	
fenoksy (dozwolone podstawienie; patrz P-63.2.2.2)	fenyloksy
formazano-1,5-diyl (podstawienie dozwolone,; P-68.3.1.3.5.2)	
formazano-3,5-diyl (podstawienie dozwolone,; P-68.3.1.3.5.2)	
formazano-1,3,5-triyl (podstawienie dozwolone,; P-68.3.1.3.5.2)	
formazan-1-yl (podstawienie dozwolone,; P-68.3.1.3.5.2)	(hydrazynylidenometylo)diazenyl
formazan-3-yl (podstawienie dozwolone,; P-68.3.1.3.5.2)	diazenylo(hydrazynylideno)metyl
formazan-5-yl (podstawienie dozwolone; P-68.3.1.3.5.2)	(diazenylometylideno)hydrazynyl
formazan-1-yl-5-yliden (podstawienie dozwolone; P-68.3.1.3.5.2)	
formazan-3-yl-5-yliden (podstawienie dozwolone; P-68.3.1.3.5.2)	
formyl (dozwolone ograniczone podstawienie; patrz P-65.1.7.2.1)	metanoil
karbamoimidoil (podstawienie dozwolone; P-65.2.1.5)	aminokarbonoimidoil
karbamoimidoiloamino (patrz P-66.4.1.2.3.1)	
karbamoil (podstawienie dozwolone; patrz P-65.2.1.5)	karbonoamidoil

karbamoiloamino (patrz P-66.1.6.1.1.3)

karbonyl (patrz P-65.2.1.5)

karbonylobis(azanodiyl) (patrz P-66.1.6.1.1.3)

oksalil (patrz P-65.1.7.2.1) etanodioil

oksalilobis(azanodiyl) (patrz P-66.1.1.4.5.2)

oksamoil (podstawienie dozwolone; patrz P-66.1.1.4.5.1)
oksamoiloamino (patrz P-66.1.1.4.5.1)

P-34.2.3 Nazwy podstawników wyprowadzone dla związków organicznych nazywanych w ogólnej lub specjalistycznej nomenklaturze.

Takie nazwy dyskutowane będą w Rozdziale 6 i Rozdziale 10.

P-34.2.4 Wstępnie wybrane nazwy podstawników

Przykłady:

-NH-OH >N-OH

hydroksyamino (wstępnie wybrany przedrostek) (patrz P-68.3.1.1.1.5)

hydroksyazanodiylo (wstępnie wybrany przedrostek) (patrz P-68.3.1.1.1.5)

$-O-NH_2$
aminooksy (wstępnie wybrany przedrostek; patrz P-68.3.1.1.1.5)

P-35 PRZEDROSTKI ODPOWIADAJĄCE GRUPOM CHARAKTERYSTYCZNYM

P-35.0 Wprowadzenie
P-35.1 Ogólna metodologia
P-35.2 Proste przedrostki określające grupy charakterystyczne
P-35.3 Zespolone przedrostki podstawnikowe
P-35.4 Kompleksowe przedrostki podstawnikowe
P-35.5 Mieszane przedrostki podstawnikowe

P-35.0 WPROWADZENIE

Przedrostki używane w nomenklaturze podstawnikowej do wskazania grup charakterystycznych mają wolną(e) wiązalność (wiązalności) przy atomach grupy 17 (F, Cl, Br i I), grupy 16 (O, S, Se, Te) i azotu. Mają one zachowane nazwy lub nazywa się je systematycznie,

metodami opisanymi dla podstawników utworzonych z macierzystych wodorków (patrz P-29). Atomy tlenu i azotu mogą też być połączone z atomami węgla, na przykład –CO-OH i –CO-CH_2-CH_3, lub atomami chalkogenów, na przykład –S(O_2)OH, -Se(O_2)OH. Te przedrostki odpowiadają przyrostkom opisanym w P-33, na przykład przedrostek 'hydroksy' dla –OH odpowiada przyrostkowi 'ol' dla tej samej grupy. Przedrostki pochodzą również od macierzystych funkcji jak opisano w P-34 i P-15.1.2, w szczególności grupy acylowe takie jak 'acetyl'dla –CO-CH_3, pochodząca z kwasu octowego, i fosforyl dla –PO<.

Przedrostki mogą mieć zarówno nazwę zachowaną jak i systematyczną i tylko jedna z nich może być preferowaną nazwą IUPAC. Aby ułatwić wybór preferowanej nazwy IUPAC wyraźne wskazówki dla każdej klasy związków podane są w rozdziale P-6. Przedrostki są też zgrupowane alfabetycznie w Załączniku 2, z określeniami ich statusu jako preferowanych nazw IUPAC a także użycia w nomenklaturze podstawnikowej jako przedrostków zamiany funkcji.

W tym podrozdziale opisane są przedrostki używane w nomenklaturze podstawnikowej i w nomenklaturze multiplikacyjnej.

P-35.1 OGÓLNA METODOLOGIA

Przedrostki podstawnikowe odpowiadające grupom charakterystycznym i związkom o macierzystych funkcjach można sklasyfikować jako proste (patrz P-29.1.1), zespolone (P-29.1.2) i kompleksowe (patrz P-29.1.3); mieszane podstawniki są podstawnikami kompleksowymi utworzonymi przez kombinację operacji podstawienia i addycji.

Wielokrotność występowania prostych przedrostków określa się podstawowymi członami zwielokrotniającymi 'di', 'tri' etc.; lub przedrostkami 'bis', 'tris', 'tetrakis' etc. dla rozróżnienia między dwoma prostymi przedrostkami a takimi, które zawierają podstawowe człony zwielokrotniające, na przykład 'disulfanyl' dla 'SSH' i 'bis(sulfanyl)', dwie grupy –SH. Zespolone i mieszane przedrostki podstawnikowe wymagają członów zwielokrotniających 'bis', 'tris', 'tetrakis' do opisu ich wielokrotności w nomenklaturze podstawnikowej.

Proste przedrostki są albo zachowane albo tworzone systematycznie następująco:

(1) Usuwając atom (atomy) wodoru z macierzystego wodorku (opisanego jako podstawnik otrzymany z macierzystego wodorku w podrozdziale P-29), na przykład 'sulfanyl', -SH, i 'diselanyl', -SeSeH; ze związku o macierzystych funkcjach, na przykład acetonyl, CH_3-CO-CH_2-; lub z nazwy skróconej, na przykład 'metoksy', CH_3-O-;

(2) Grupy acylowe powstają w wyniku usunięcia wszystkich grup –OH z oksokwasów, na przykład 'acetyl', CH_3-CO- i 'karbonyl' , >CO.

P-35.2 PROSTE PRZEDROSTKI WSKAZUJĄCE GRUPY CHARAKTERYSTYCZNE

P-35.2.1 Zachowane tradycyjne przedrostki

-F
fluoro (wstępnie wybrany przedrostek)

-Cl
chloro (wstępnie wybrany przedrostek)

-Br
bromo (wstępnie wybrany przedrostek)

-I-
jodo (wstępnie wybrany przedrostek)

-OH
hydroksy (wstępnie wybrany przedrostek)

=O
okso (wstępnie wybrany przedrostek)

-O-
oksy (wstępnie wybrany przedrostek)

-COOH
karboksy (preferowany przedrostek)

-SO_2-OH
sulfo (wstępnie wybrany przedrostek)
selenono (Se zamiast S; wstępnie wybrany przedrostek)
tellurono (Te zamiast S; wstępnie wybrany przedrostek)

-SO-OH
sulfino (wstępnie wybrany przedrostek)
selenino (Se zamiast S; wstępnie wybrany przedrostek)
telluryno (Te zamiast S; wstępnie wybrany przedrostek)

-NH_2
amino (wstępnie wybrany przedrostek)

-N_3
azydo (wstępnie wybrany przedrostek)

=NH
imino (do tego samego atomu, wstępnie wybrany przedrostek)

-N<
nitrylo (do trzech atomów, wstępnie wybrany przedrostek)

Uwaga: dla rozróżnienia między =NH i –NH- (obie grupy potocznie nazywane ‘imino’) i pomiedzy –N< i -N= (obie grupy potocznie nazywane ‘nitrylo’) zaleca się dla drugiej grupy w każdej parze nazwy systematyczne oparte na nazwie macierzystego wodorku azanu).

=N_2
diazo (wstępnie wybrany przedrostek)

-CN
cyjano (preferowany przedrostek)

-NC
izocyjano (preferowany przedrostek)

-NCO
izocyjaniano (preferowany przedrostek)
izotiocyjaniano (S zamiast O; preferowany przedrostek)
izoselenocyjaniano (Se zamiast O; preferowany przedrostek)
izotellurocyjaniano (Te zamiast O; preferowany przedrostek)

P-35.2.2 Podstawniki utworzone w wyniku usunięcia jednego lub większej liczby atomów wodoru z mono- i dinuklearnych macierzystych wodorków (patrz P-21.1, P-21.2).

Nazwy systematyczne tworzy się według ogólnej metodologii opisanej w P-29.3.1.

Przykłady:

-SH
sulfanyl (wstępnie wybrany przedrostek) (nie merkapto)

-S-
sulfanodiyl (wstępnie wybrany przedrostek) tio

=S
sulfanylideno
tiokso

-SS-
disulfanodiylo (wstępnie wybrany przedrostek)
ditio

-SeH
selanyl (wstępnie wybrany przedrostek) (nie selenyl)

-Se-
selanodiyl (wstępnie wybrany przedrostek)
seleno

=Se

selanylideno (wstępnie wybrany przedrostek)
selenokso

-SeSe-

diselanodiyl (wstępnie wybrany przedrostek)
diseleno

-TeH

tellanyl (wstępnie wybrany przedrostek)

-Te-

tellanodiyl (wstępnie wybrany przedrostek)

=Te

tellanylideno (wstępnie wybrany przedrostek)

-TeTe-

ditellanodiyl (wstępnie wybrany przedrostek)

H_2N-NH-

hydrazyny (wstępnie wybrany przedrostek)
diazanyl

HN=N-

diazenyl (wstępnie wybrany przedrostek)

-NH-

azanodiyl (wstępnie wybrany przedrostek)
(do różnych atomów)

Nazwa systematyczna oparta na macierzystym wodorku azanie jest preferowaną nazwą IUPAC dla –HN–, w celu odróżnienia od =NH . Oba pospolicie nazywane są ‘imino’.

–N=

azanylyliden (wstępnie wybrany przedrostek)
(do różnych atomów)

≡N

azanylidyn (wstępnie wybrany przedrostek)
(do tego samego atomu)

Nazwa systematyczna oparte na macierzystym wodorku azanie jest preferowaną nazwą IUPAC dla –N= w celu odróżnienia od >N-. Oba pospolicie nazywane są ‘nitrylo’.

P-35.2.3 Proste przedrostki utworzone ze związków o macierzystych funkcjach

Kilka prostych przedrostków pochodzących od związków o macierzystych funkcjach jest opisanych w P-34 and P-67.

Przykłady:

-CO-

karbonyl (preferowany przedrostek;
patrz P-65.2.1.5)

-PO<

fosforyl [wstępnie wybrany przedrostek;
patrz P-67.1.4.1(b)]

$-SO_2-$

sulfonyl (wstępnie wybrany przedrostek;
patrz P-65.3.2.3)
sulfuryl

-SO-

sulfinyl (wstępnie wybrany przedrostek
patrz P-65.3.2.3)
tionyl

$-SeO_2-$	-SeO-
selenonyl (wstępnie wybrany przedrostek; patrz P-65.3.2.3)	seleninyl (wstępnie wybrany przedrostek; patrz P-65.3.2.3)
$-TeO_2$	-TeO-
telluronyl (wstępnie wybrany przedrostek; patrz P-65.3.2.3)	tellurynyl (wstępnie wybrany przedrostek; patrz P-65.3.2.3)
CH_3-CO- acetyl (preferowany przedrostek; patrz P-65.1.7.2.1)	C_6H_5-CO- benzoil (preferowany przedrostek; patrz P-65.1.7.2.1)

P-35.3 ZESPOLONE PRZEDROSTKI PODSTAWNIKOWE

P-35.3.1 Nazwy zespolonych przedrostków wywodzące się z przyrostków lub związków o macierzystych funkcjach można utworzyć podstawiając proste przedrostki do innych prostych przedrostków. Jeżeli istnieje wybór, P-67.4 dostarcza informacji jak wybrać preferowany zespolony przedrostek.

Przykłady:

-SSeH	selanylosulfanyl (wstępnie wybrany przedrostek)
-NH-Cl	chloroamino (wstępnie wybrany przedrostek)
$-NH-CH_3$	metyloamino (preferowany przedrostek)
-PH-Cl	chlorofosfanyl (wstępnie wybrany przedrostek)

P-35.3.2 Nazwy zespolonych przedrostków wywodzące się z przyrostków lub związków o macierzystych funkcjach można utworzyć w wyniku operacji addycji nazywanej powiązaniem. Robi się to aby zgromadzić proste mono-, di, tri- i tetrawalencyjne przedrostki. Diwalencyjne przedrostki hydrokarbylowe można dołączyć do przedrostków wyrażających grupy charakterystyczne. Taka metoda jest używana kiedy nie ma podstawialnych atomów wodoru (patrz P-15.1); jest również stosowana do tworzenia podstawników w nomenklaturze multiplikacyjnej (patrz P-15.3.1.2.2).

Przykłady:

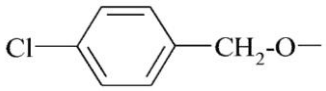
$-O-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-CH_3$	pentyloksy (preferowany przedrostek)
$-O-C_6H_5$	benzyloksy (preferowany przedrostek)
-CO-Cl	karbonochlorydoil (preferowany przedrostek) chlorokarbonyl
-C(=NH)-OH	*C*-hydroksykarbonoimidoil (preferowany przedrostek) hydroksyl(imino)metyl
$-O-CH_2-CH_2-O-$	etano-1,2-diylobis(oksy) (preferowany przedrostek)

>N-CH_2-N<	metylenodinitrylo (preferowany przedrostek)
>P(S)-CH_2-P(S)<	metylenobis(fosforotioil) (preferowany przedrostek)

P-35.4 KOMPLEKSOWE PRZEDROSTKI PODSTAWNIKOWE

P-35.4.1 Nazwy kompleksowych przedrostków podstawników można utworzyć podstawiając proste lub zespolone przedrostki podstawników do zespolonego przedrostka podstawnika. Jeżeli istnieje wybór P-57.4 podaje jak wybrać preferowany kompleksowy przedrostek podstawnika.

Przykłady:

-NH-S-SeH	(selanylosulfanylo)amino (wstępnie wybrany przedrostek)
-NH-CH_2-Cl	(chlorometylo)amino (preferowany przedrostek)
	(4-chlorofenylo)metoksy (preferowany podstawnik)
-PH-NH-OCH_3	(metoksyamino)fosfanylo (preferowany przedrostek)

P-35.4.2 Nazwy kompleksowych przedrostków podstawników można tworzyć dodając proste lub zespolone przedrostki podstawników do zespolonego przedrostka podstawnika w procesie zwanym ‘powiązaniem’.

Przykłady:

-CO-O-CH_2-C_6H_5	(benzyloksy)karbonyl (preferowany przedrostek)
-O-CS-OCH_3	(metoksykarbonotioil)oksy (preferowany przedrostek)
-CS-O-P(O)$(OCH_3)_2$	[(dimetoksyfosforyl)oksy]karbonotioil (preferowany przedrostek)

P-35.5 MIESZANE PRZEDROSTKI PODSTAWNIKOWE

P-35.5.1 Mieszane przedrostki podstawników tworzy się łącząc operacje podstawienia i addycji.

Przykłady:

CH_3-CH_2-O-SO-NH	(etoksysulfinylo)amino (preferowany przedrostek)
CH_3-CO-S-CO-	(acetylosulfanylo)karbonyl (preferowany przedrostek)
CH_3-CO-O-NH-SO-O-	{[(acetyloksy)amino]sulfinyl}oksy (preferowany przedrostek)

$(HS)_2(O)P\text{-}NH$	[bis(sulfanylo)fosforylo]amino (wstępnie wybrany przedrostek)

ROZDZIAŁ P-4. REGUŁY TWORZENIA NAZW

P-40 Wprowadzenie
P-41 Porządek starszeństwa klas
P-42 Porządek starszeństwa kwasów
P-43 Porządek starszeństwa przyrostków
P-44 Porządek starszeństwa struktur macierzystych
P-45 Wybór preferowanej nazwy IUPAC
P-46 Główny łańcuch w podstawnikach

P-40 WPROWADZENIE

W tym rozdziale opisano reguły dotyczące tworzenia nazw. Zostało uwzględnione to, że w chemicznej dyskusji czasami wygodnym jest odstąpienie od surowych reguł po to, aby zapewnić nazwie lepsze odzwierciedlenie chemicznej właściwości lub dla uniknięcia niejasności ważnej cechy. Jednakże, tego rodzaju odstępstw można dopuszczać się tylko w dobrze uzasadnionych przypadkach, a nazw powstałych w ten sposób, nie zaleca się stosować powszechnie w publikacjach.

Zasady i reguł opisane w tym rozdziale zostały pomyślane tak, aby stosowanie ich prowadziło do preferowanych nazw IUPAC. Preferowane nazwy IUPAC niekoniecznie są celem praktykującego chemika, który pragnie komunikować się ze swoimi kolegami za pomocą znanych, dobrze rozumianych określeń. Mogą być one bardziej przydatne wówczas gdy cytuje się chemiczne nazwy w legislacyjnych i międzynarodowych zawodowych lub handlowych dokumentach, oraz przy tworzeniu programów indeksowania, baz danych i systemów odzyskiwania danych.

W rozdziale tym zawarte są ogólne reguły i kolejność starszeństwa stosowane w nomenklaturze podstawnikowej i jeśli to konieczne w innych rodzajach nomenklatury.

P-41 PORZĄDEK STARSZEŃSTWA KLAS

Porządek starszeństwa klas jest podany w Tabeli 4.1. Uszeregowano w niej klasy wyrażone przyrostkami (klasy od 1 do 20) i klasy w oparciu o najstarszy atom w związkach (klasy od 21 do 43).

Tabela 4.1 Ogólne klasy związków wymienione w malejącym porządku starszeństwa

1	Rodniki
2	Anionorodniki
3	Kationorodniki
4	Aniony
5	Zwitterjony (jony obojnacze)
6	Kationy
7	Kwasy
7a	‘Przyrostek’ kwasy w kolejności: karboksylowe (z wyłączeniem karbonowego i kwasów polikarbonowych, które należą do podklasy ‘7b’), sulfonowe, selenowe, tellurowe,

tellurinowe, po których po kolej następują odpowiednie kwasy peroksowe, imidowe i hydrazonowe. Analogi chalkogenowe następują po odpowiednim kwasie tlenowym i, w każdym przypadku, analog chalkogenowy z większą liczbą preferowanych atomów chalkogenu (O > S > Se > Te), jest brany pod uwagę najpierw w grupach –OOH, a następnie w grupach –OH. (Patrz P-42 - kompletna lista starszeństwa kwasów, P-43 – przyrostki modyfikowane zamianą funkcji i Tabela 4.4 zawierająca obszerną listę porządku starszeństwa tych przyrostków.)

7b Kwasy węglowe bez zdolnych do podstawienie atomów wodoru, w kolejności: polinuklearne kwasy karbonowe (kwasy trikarbonowe, kwasy dikarbonowe), następnie kwas karbonowy i kwas cyjanowodorowy.

7c Kwasy tlenowe zawierające podstawialne atomy wodoru związane z ich centralnymi atomami i ich kwasowe pochodne w następującym malejącym porządku starszeństwa: kwasy azonowe, azynowe, fosfonowe, fosfinowe, fosfonawe, fosfinawe, *etc.* (patrz P-42 - kompletna list).

7d Mononuklearne i polinuklearne kwasy tlenowe inne niż kwasy węglowe, bez podstawialnych atomów wodoru przyłączonych do ich centralnego atomu (patrz 7b powyżej), ale które mogą być sfunkcjonalizowane lub mogą tworzyć pochodne przez zamianę funkcji na taką, która ma podstawialny atom wodoru.

7e Inne jednozasadowe ‘oksokwasy’ używane jako funkcyjne związki macierzyste.

8 Bezwodniki [nomenklatura podstawnikowa jest stosowana do cyklicznych bezwodników, które nazywa się jako związki heterocykliczne (patrz 16 poniżej); nazwy klas funkcyjnych stosuje się do acyklicznych bezwodników i do kilku cyklicznych bezwodników, odpowiadających kwasom o zachowanych nazwach; przy stosowaniu nazw funkcyjnych cykliczne bezwodniki są preferowane względem bezwodników acyklicznych].

9 Estry (nazwy klasowo-funkcyjne stosuje się do acyklicznych estrów; laktony i inne cykliczne estry są nazywane jako związki heterocykliczne; patrz 16 poniżej).

10 Halogenki kwasowe i pseudohalogenki [najpierw w kolejności odpowiednich kwasów podanych powyżej, następnie w kolejności atomów halogenów (-F > -Cl -Br > -J); potem w kolejności grup pseudohalogenowych (-N_3 > -CN > -NC –NCO > NCS > -NCSe > -NCTe > -CNO).

11 Amidy [w kolejności odpowiednich kwasów; cykliczne amidy są nazywane jako związki heterocykliczne (patrz 16 poniżej)].

12 Hydrazydy (w kolejności odpowiednich kwasów).

13 Imidy (obejmuje tylko cykliczne imidy powstałe z organicznych dwu- lub wielozasadowych kwasów o zachowanych nazwach).

14 Nitryle

15 Aldehydy i chalkogenowe analogi.

16 Ketony (typu –C-CO-C-), pseudoketony (typu –C-CO-X, X-CO-X lub –CO-X-CO gdzie X ≠ C, halogen, pseudohalogen lub NH_2, patrz P-64.1.2) i heterony (patrz P-64.4). W związku z laktonami, laktamami, bezwodnikami i imidami patrz klasy 8, 9 i 11.

17 Związki hydroksylowe i chalkogenowe analogi (łącznie z alkoholami i fenolami, które nie mają już odrębnego porządku kolejności).

18 Wodoronadtlenki (peroksole), to znaczy –OOH.

19 Aminy (zdefiniowane jako trzy pojedyncze kowalencyjne połączenia z atomem azotu, np. NR_3).

20 Iminy, R=NH lub R=N-R'.

Klasy oznaczone przez starszy atom w nomenklaturze heteranów

21 Związki azotu: heterocykliczne, poliazany, hydrazyny (z wyjątkiem hydrazydów), diazeny, hydroksyloaminy, azany (z wyjątkiem amidów, amin i imin)

22 Związki fosforu: heterocykliczne, polifosfany, fosfany

23 Związki arsenu: heterocykliczne, poliarsany, arsany

24 Związki antymonu: heterocykliczne, polistybany, stybany

25 Związki bizmutu: heterocykliczne, polibizmutany, bizmutany

26 Związki krzemu: heterocykliczne, polisilany, silany

27 Związki germanu: heterocykliczne, poligermanany, germanany

28 Związki cyny: heterocykliczne, polistanany, stanany

29 Związki ołowiu: heterocykliczne, poliplumbany, plumbany

30 Związki boru: heterocykliczne, poliborany, borany

31 Związki glinu: heterocykliczne, polialumany, alumany

32 Związki galu: heterocykliczne, poligalany, galany

33 Związki indu: heterocykliczne, poliindygany, indygany

34 Związki talu: heterocykliczne, politalany, talany

35 Związki tlenu: heterocykliczne, polioksydany (trioksydany ale nie peroksole ani etery)

36 Związki siarki: heterocykliczne, polisulfany (trisulfany, λ^6 i λ^4 mono i disulfany, ale nie disulfidy lub sulfidy)

37 Związki selenu: heterocykliczne, poliselany (triselany ale nie diselenidy, selenidy)

38 Związki telluru: heterocykliczne, politellurany (tritellurany ale nie ditelluridy, telluridy)

39 Związki λ^7, λ^5 i λ^3 halogenowe, w kolejności F > Cl > Br > J

40 Związki węgla: pierścieniowe, łańcuchowe

41 Etery, następnie sulfidy, sulfoksydy (sulfotlenki), sulfony; i dalej selenidy, selenoksydy (selenotlenki) itd.

42 Peroksole (nadtlenki), następnie analogi chalkogenowe z większą liczbą atomów starszego chalkogenu, gdzie O > S > Se > Te

43 Związki λ^1 halogenu w kolejności F > Cl > Br > J

---

* W tabeli symbol ‘>’ oznacza ‘jest starszy od’.

Przykłady:

$HOOC\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}$

2-karboksyetyl (PIN)
[wolna wiązalność = rodnik > kwas karboksylowy

$(CH_3)_3N^+\text{-}CH_2\text{-}COO^-$

(trimetyloazaniumylo)octan (PIN)
(anion > kation)

$HO\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}CONH_2$

3-hydroksypropanoamid (PIN)
(amid > alkohol)

$OHC\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}CN$

4-oksobutanonitryl (PIN)
(nitryl > aldehyd)

$HSSS\text{-}SiH_3$

(trisulfanylo)silan (nazwa wstępnie wybrana (patrz P-12.2) (Si > S)

$BH_2\text{-}PH_2$

boranylofosfan (nazwa wstępnie wybrana patrz P-12.2) (P > B)

$(CH_3)_4Si$

tetrametylosilan (PIN)
(Si > C)

$(C_6H_5)_3P$

trifenylofosfan (PIN)
(P > C)

$CH_3\text{-}O\text{-}CH_2\text{-}S\text{-}CH_3$

metoksy(metylosulfanylo)metan
(C > eter i sulfid)

$CH_3\text{-}SeSe\text{-}CH_2\text{-}S\text{-}CH_3$

(metylodiselanylo)(metylosulfanylo)metan (PIN)
(C > diselenid i sulfid)

$CH_3\text{-}S\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}SO\text{-}CH_3$

1-(metanosulfanylo)-2-(metylosulfinylo)etan (PIN)
(C > sulfid i sulfon)

P-42 PORZĄDEK STARSZEŃSTWA KWASÓW

Kwasy klasy 7 (patrz tabela 4.1) w kolejności klas związków są dalej podzielone na podklasy. Odpowiada to kwasom wyrażanym przez przyrostki i kwasom występującym jako związki macierzyste (patrz P-34). Następujące podsekcje uzupełnia krótki opis podany w Klasie 7; kwasy są przedstawione w kolejności malejącego starszeństwa.

P-42.1	Klasa 7a	Kwasy wyrażone przez przyrostki (z wyłączeniem kwasów karbonowych i polikarbonowych)
P-42.2	Klasa 7b	Kwasy węglowe bez podstawialnego atomu wodoru
P-42.3	Klasa 7c	Kwasy niewęglowe zawierające przy centralnym atomie podstawialny atom wodoru
P-42.4	Klasa 7d	Kwasy niewęglowe stosowane do tworzenia pochodnych mających podstawialne atomy wodoru
P-42.5	Klasa 7e	Inne monozasadowe ‘okso’ kwasy używane jako funkcyjne związki macierzyste

P-42.1 KLASA 7A.. NAZWY KWASÓW WYRAŻANE PRZEZ PRZYROSTKI (Z WYŁĄCZENIEM KWASÓW KARBONOWEGO I POLIKARBONOWYCH)

kwasy karboksylowe	-COOH	kwas -karboksylowy
	-(C)OOH	kwas –owy

kwas sulfonowy	$-SO_2-OH$	kwas -sulfonowy
kwas sulfinowy	-SO-OH	kwas -sulfinowy
kwas selenowy	$-SeO_2-OH$	kwas -selenowy
kwas selenawy	-SeO-OH	kwas -selenawy
kwas tellurowy	$-TeO_2-OH$	kwas -tellurowy
kwas tellurawy	-TeO-OH	kwas -tellurawy

P-42.2 KLASA 7B. KWASY WĘGLOWE BEZ PODSTAWIALNYCH ATOMÓW WODORU

kwasy polikarbonowe

kwas dikarbonowy

kwas karbonowy

kwas cyjanowodorowy

P-42.3 KLASA 7C. KWASY NIEWĘGLOWE MAJĄCE NA ATOMIE CENTRALNYM PODSTAWIALNE ATOMY WODORU

Wszystkie nazwy należą do nazw wstępnie wybranych. W tej klasie kryterium starszeństwa podane jest w malejącej kolejności:

(a) atom centralny pierwszy na liście: N > P > As > Sb > B;

(b) maksymalna liczba atomów centralnych;

(c) homopolikwasy (izopolikwasy) (patrz odnośnik 12);

(d) mające sąsiednie atomy centralne;

(e) maksymalna liczba grup kwasowych (-OH);

(f) najwyższy stopień utlenienia centralnego atomu.

Dla zgodności, w nazwach polinuklearnych oksokwasów, numeryczny wrostek ‘di’ został użyty jednakowo w nazywaniu dinuklearnych kwasów ‘hypo’, na przykład kwas hypodifosforawy zamiast kwas hypofosforawy.

kwas azonowy	$NH(O)(OH)_2$
kwas azynowy	$NH_2(O)(OH)$
kwasy polifosfonowe	$(HO)PH(O)-O-[PH(O)-O-]_nPH(O)(OH)$
kwas difosfonowy	(HO)PH(O)-O-PH(O)(OH)
kwas hypodifosfonowy (przedrostek ‘hypodi’ patrz P-67.1)	(HO)(O)HP-PH(O)(OH)
kwas fosfonowy	$PH(O)(OH)_2$
kwas polifosfonowy	$(HO)PH-O-[PH-O-]_nPH(OH)$
kwas difosfonowy	(HO)PH-O-PH(OH)

kwas hypodifosfonowy (HO)PH-PH(OH)
(przedrostek ‘hypodi’ patrz P-67.2.1)

kwas fosfonawy $PH(OH)_2$

kwas fosfinowy $PH_2(O)(OH)$

kwas fosfinawy $PH_2(OH)$

kwas poliarsenowy > kwas diarsenowy > kwas hypodiarsenowy
przedrostek ‘hypodi’ patrz P-67.2.1)

kwas arsonowy $AsH(O)(OH)_2$

kwas poliarsonawy > kwas diarsonawy > kwas hypodiarsonawy
(przedrostek ‘hypodi’ patrz P-67.2.1)

kwas arsonawy $AsH(OH)_2$

kwas arsynowy $AsH_2(O)(OH)$

kwas arsynawy $AsH_2(OH)$

kwasy polistybonowe > kwas distybonowy > hypodistybonowy
(przedrostek ‘hypodi’ patrz P-67.2.1)

kwas stybonowy $SbH(O)(OH)_2$

kwasy polystybonawe > kwas distybonawy > kwas hypodistybonawy
(przedrostek ‘hypodi’ patrz P-67.2.1)

kwas stybonawy $SbH(OH)_2$

kwas stybinowy $SbH_2(O)(OH)$

kwas stybinawy $SbH_2(OH)$

kwas diboronowy (HO)BH-O-BH(OH)

kwas hypodiboronowy (HO)HB -BH(OH)
(przedrostek ‘hypodi’ patrz P-67.2.1)

kwas boronowy $BH(OH)_2$

kwas borynowy $BH_2(OH)$

P-42.4 KLASA 7D. KWASY NIEWĘGLOWE UŻYTE DO GENEROWANIA POCHODNYCH O PODSTAWIALNYCH ATOMACH WODORU

Wszystkie nazwy są nazwami wstępnie wybranymi.

W tej klasie kryteria starszeństwa podane są w malejącym porządku:

(a) atom centralny pierwszy na liście: P > As > Sb > Si > B > S > Se > Te;

(b) maksymalna liczba atomów centralnych;

(c) kwasy homopoli (kwasy izopoli) (patrz odnośnik 12);

(d) polikwasy zawierające przyległe atomy centralne;

(e) maksymalna liczba grup kwasowych (-OH);

(f) najwyższy stopień utlenienia centralnego atomu.

kwas polifosforowy $(HO)_2P(O)\text{-}O\text{-}[PO(OH)\text{-}O\text{-}]_nP(O)(OH)_2$

kwas polifosforawy $(HO)_2P\text{-}O\text{-}[P(OH)\text{-}O]_n\text{ -}P(OH)_2$

kwas tetrafosforowy $(HO)_2P(O)\text{-}O\text{-}P(O)(OH)\text{-}O\text{-}P(O)(OH)\text{-}O\text{-}P(O)(OH)_2$

kwas trifosforowy $HO)_2P(O)\text{-}O\text{-}P(O)(OH)\text{-}O\text{-}P(O)(OH)_2$

kwas difosforowy $(HO)_2P(O)\text{-}O\text{-}P(O)(OH)_2$

kwas difosforawy $(HO)_2P\text{-}O\text{-}P(OH)_2$

kwas hypodifosforowy $(HO)_2(O)P\text{-}P(O)(OH)_2$

(przedrostek ‘hypodi’ patrz P-67.2.1)

kwas hypodifosforawy $(HO)_2P\text{-}P(OH)_2$

(przedrostek ‘hypodi’ patrz P-67.2.1)

kwas fosforowy $P(O)(OH)_3$

kwas fosforawy $P(OH)_3$

kwasy poliarsenowe > kwasy poliarsenawe > kwas diarsenowy > kwas diarsenawy >
kwas hypodiarsenowy > kwas hypodiarsenawy

(przedrostek ‘hypodi’ patrz P-67.2.1)

kwas arsorowy $As(O)(OH)_3$

kwas arsorawy $As(OH)_3$

kwasy polistybonowe > kwasy polystybonawe > kwas distybonowy > kwas distybonawy >
kwas hypodistybonowy > kwas hypodistybonawy

(for the prefix 'hypodi', see P-67.2.1)

kwas stybonowy $Sb(O)(OH)_3$

kwas stybonawy $Sb(OH)_3$

kwas ortokrzemowy $Si(OH)_4$

kwas diborowy $(HO)_2B\text{-}O\text{-}B(OH)_2$

kwas hypoborowy $(HO)_2B\text{-}B(OH)_2$

kwas borowy $B(OH)_3$

kwasy polisiarkowe $(HO)SO_2\text{-}O\text{-}[SO_2(OH)\text{-}O\text{-}]_nSO_2(OH)$

kwasy polisiarkawe $(HO)SO\text{-}O\text{-}[SO(OH)\text{-}O\text{-}]_nSO(OH)$

kwas disiarkowy $(HO)SO_2\text{-}O\text{-}SO_2(OH)$

kwas disiarkawy $(HO)S(O)\text{-}O\text{-}S(O)(OH)$

kwas hypodisiarkowy $(HO)O_2S\text{-}SO_2(OH)$

(kwas ditionowy)

(przedrostek ‘hypodi’ patrz P-67.2.1)

kwas hypodisiarkawy $(HO)(O)S\text{-}S(O)(OH)$

(kwas ditionawy)

kwas siarkowy $S(O)_2(OH)_2$

kwas siarkawy $S(O)(OH)_2$

kwasy poliselenowe > kwasy poliselenawe > kwas diselenowy > kwas diselenawy > kwas hypodiselenowy > kwas hypodiselenawy

(przedrostek ‘hypodi’ patrz P-67.2.1)

kwas selenowy $Se(O)_2(OH)_2$

kwas selenawy $Se(O)(OH)_2$

kwasy politellurowe > kwasy politellurawe > kwas ditellurowy > kwas ditellurawy > kwas hypoditellurowy > kwas hypoditellurawy

(przedrostek ‘hypodi’ patrz P-67.2.1)

kwas tellurowy $Te(O)_2(OH)_2$

kwas tellurawy $Te(O)(OH)_2$

P-42.5 KLASA 7E. INNE JEDNOZASADOWE ‘OKSO’ KWASY UŻYWANE JAKO FUNKCYJNE ZWIĄZKI MACIERZYSTE

Wszystkie nazwy należą do nazw wstępnie wybranych. W tej klasie kryterium starszeństwa podane jest w malejącym porządku:

(a) centralny atom, w kolejności N > F > Cl > Br > I;

(b) centralny atom, o najwyższym stopniu utlenienia

kwas azotowy	$HO\text{-}NO_2$
kwas azotawy	HO-NO
kwas perfluorowy	$F(O)_3OH$
kwas fluorowy	$F(O)_2OH$
kwas fluorawy	F(O)OH
kwas hypofluorawy	FOH
kwas perchlorowy	$Cl(O)_3OH$
kwas chlorowy	$Cl(O)_2OH$
kwas chlorawy	Cl(O)OH
kwas hypochlorawy	ClOH
kwas perbromowy	$Br(O)_3OH$
kwas bromowy	$Br(O)_2OH$
kwas bromawy	Br(O)OH
kwas hypobromawy	BrOH
kwas perjodowy	$I(O)_3OH$
kwas jodowy	$I(O)_2OH$
kwas jodawy	I(O)OH

kwas hypojodawy IOH

P-43 PORZĄDEK STARSZEŃSTWA PRZYROSTKÓW

P-43.0 Wprowadzenie

P-43.1 Ogólna metodologia zastępowania funkcji

P-43.0 WPROWADZENIE

Przyrostki modyfikuje się w sposób pokazany w Tabeli 4.3 dla kwasów i w Tabeli 4.4 dla wszystkich przyrostków podstawników. W niniejszej sekcji opisano kolejność starszeństwa przyrostków. Opiera się ona na starszeństwie klas od 7 do 20 przedstawionej w Tablicy 4.1 i obejmuje przyrostki modyfikowane przez funkcje macierzyste.

P-43.1 OGÓLNA METODOLOGIA ZAMIANY FUNKCJI

Przyrostki modyfikuje się w sposób pokazany w Tabeli 4.3 dla kwasów i w Tabeli 4.4 dla kwasów i innych klas. Przedrostki i wrostki są wykorzystywane w sposób podany w Tabeli 4.2. Przedrostki są stosowane do modyfikowania przyrostków takich jak ‘ol’ i ‘al’, na przykład ‘tiol’ i ‘tial’. Wrostki zaleca się stosować do modyfikacji przyrostków ‘kwas karboksylowy’, ‘kwas sulfonowy’ i pokrewnych przyrostków, na przykład ‘kwas karboperoksowy’ i ‘kwas sulfonoditiowy’.

Tabela 4.2 Przedrostki i wrostki, w malejącym porządku starszeństwa, używane do tworzenia przyrostków wskazujących zamianę funkcji w preferowanych nazwach IUPAC

Przedrostek	Wrostek	Zastępowany atom(y)	Zastępujący atom(y)
peroksy-	-perokso-	-O-	-OO-
tioperoksy-	-(tioperokso)-	-O-	-OS- lub -SO-
ditioperoksy-	-(ditioperokso)-	-O-	-SS-
tio-	-tio-	-O- lub =O	-S- lub =S
seleno-	-seleno-	-O- lub =O	-Se- lub =Se
telluro-	-telluro-	-O- lub =O	-Te- lub =Te
imido-	-imido-	=O	=NH
hydrazono-	-hydrazono-	=O	$=NNH_2$

Kiedy występuje kilka wymienialnych atomów tlenu, następujące kryteria starszeństwa stosuje się kolejno aż do osiągnięcia rozstrzygnięcia:

(a) maksymalna liczba atomów tlenu, następnie atomy S, Se i Te, grupy =NH i $=NNH_2$;

(b) maksymalna liczba atomów tlenu, potem atomy S, Se i Te, w grupach –OO-;

(c) atomy tlenu następnie atomy S, Se i Te, w grupach –(O)OH i –OH.

Porządek starszeństwa w przypadku kwasów karboksylowych, kwasów sulfonowych i kwasów sulfinowych opisano przez wskazanie, po nazwie zmodyfikowanego przyrostka, liczby i rodzaju atomów użytych w operacji zamiany (patrz Tabela 4.3)

Tabela 4.3 zawiera listę, w malejącym porządku starszeństwa, przyrostków i przyrostków modyfikowanych przez zamianę funkcji, dla kwasów karboksylowych i kwasów sulfonowych. Przyrostki kwasów sulfinowych są podobne do przyrostków kwasów sulfonowych. Przyrostki dla kwasów selenowych i tellurowych tworzy się przez zamianę ‘sulf’ przez ‘selen’ lub ‘tellur’.

Tabela 4.3 Przyrostki kwasów karboksylowych i sulfonowych tworzone wg nomenklatury zamiennej funkcji w preferowanych nazwach IUPAC, w malejącym porządku starszeństwa

1 Kwasy karboksylowe

-COOH	kwas karboksylowy	
-CO-OOH	kwas karboperoksowy	(3O)
-CS-OOH	*OO*-kwas karboperoksotiowy	(2O,1S; OO)
-CSe-OOH	kwas karboperoksoselenowy	(2O,lSe; OO)
-CO-SOH	*SO*-kwas karbo(tioperoksowy)	(2O,1S; OS; OH)
-CO-OSH	*OS*-kwas karbo(tioperoksowy)	(2O,IS; OS; SH)
-CO-SeOH	*SeO*-kwas karbo(selenoperoksowy)	(2O,lSe; OSe; OH)
-CO-OSeH	*OSe*-kwas karbo(selenoperoksowy)	(2O,lSe; OSe; SeH)
-CS-SOH	*SO*-kwas karbotio(tioperoksowy)	(1O,2S; OS; OH)
-CS-OSH	*OS*-kwas karbotio(tioperoksowy)	(1O,2S; OS; SH)
-CSe-OSH	*OS*-kwas karboseleno(tioperoksowy)	(1O,lS,lSe;OS; SH)
-CS-SeOH	*SeO*-kwas karbo(selenoperokso)tiowy	(1O,lS,lSe;OSe: OH)
-CS-OSeH	*OSe*-kwas karbo(selenoperokso)tiowy	(1O,lS,lSe; OSe; SeH)
-CS-SSH	kwas karbo(ditioperokso)tiowy	(3S)
-CSe-SeSeH	kwas karbo(diselenoperokso)selenowy	(3Se)
-CTe-TeTeH	kwas karbo(ditelluroperokso)tellurowy	(3Te)
-CS-OH	*O*-kwas karbotiowy	(1O,1S; OH)
-CO-SH	*S* -kwas karbotiowy	(1O,1S; SH)
-CS-SH	kwas karboditiowy	(2S)
-CSe-SH	*S*-kwas karboselenotiowy	(lS,lSe; SH)
-CS-SeH	*Se*-kwas karboselenotiowy	(lS,lSe; SeH)
-CSe-SeH	kwas karbodiselenowy	(2Se)
-CTe-SeH	*Se*-kwas karboselenotellurowy	(lSe,lTe; SeH)
-CTe-TeH	kwas karboditellurowy	(2Te)
-C(=NH)-OH	kwas karboksyimidowy	

-C(=NH)-OOH	kwas karboksyimidoperoksowy	(2O,IN; OO)
-C(=NH)-SOH	*SO*-kwas karbohydrazono(tioperoksowy)	(1O,1S,1N; OS; OH)
-C(=NH)-OSH	*OS*-kwas karbohydrazono(tioperoksowy)	(1O,1S,1N; OS; SH)
-C(=NH)-SSH	kwas karbo(ditioperokso)imidowy	(2S,1N; SS)
-C(=NH)-SeSH	*SeS*-kwas karboksyimido(selenotioperoksowy)	(1S,lSe,lN; SSe; SH)
-C(=NH)-SH	kwas karboksyimidotiowy	(1S,1N)
-C(=NH)-SeH	kwas karboksyimidoselenowy	(lSe,lN)
-C(=NH)-TeH	kwas karboksyimidotellurowy	(lTe,lN)
C(=NNH_2)-OH	kwas karbohydrazonowy	
-C(=NNH_2)-OOH	kwas karbohydrazonoperoksowy	(2O,INN; OO)
-C(=NNH_2)-SOH	*SO*-kwas karboksyimido(tioperoksowy)	(1O,1S,1NN; OS; OH)
-C(=NNH_2)-OSH	*OS*-kwas karboksyimido(tioperoksowy)	(1O,1S,1NN; OS; SH)
-C(=NNH_2)-TeTeH	kwas karbo(ditelluroperokso)hydrazonowy	(2Te,lNN; TeTe)

2 Kwasy sulfonowe

-SO_2-OH	kwas sulfonowy	
-SO_2-OOH	kwas sulfonoperoksowy	(4O)
-S(O)(S)-OOH	*OO*-kwas sulfonoperoksotiowy	(3O,1S; OO)
-S(O)(Se)-OOH	*OO*-kwas sulfonoperoksoselenowy	(3O,lSe; OO)
-SO_2-SOH	*SO*-kwas sulfono(tioperoksowy)	(3O,1S; OS; OH)
-SO_2-OSH	*OS*-kwas sulfono(tioperoksowy)	(3O,1S; OS; SH)
-SS_2-OOH	*OO*-kwas sulfonoperoksoditiowy	(2O,2S; OO)
-S(O)(S)-SOH	*SO*-kwas sulfonotio(tioperoksowy)	(2O,2S; OS; OH)
-S(S)(Se)-OOH	*OO*-kwas sulfonoperoksoselenotiowy	(2O,lS,lSe; OO)
-SSeSe-SSH	kwas sulfono(ditioperokso)diselenowy	(2S,2Se; SS)
-SS_2-SeSeH	kwas sulfono(diselenoperokso)ditiowy	(2S,2Se; SeSe)
-STe_2-TeTeH	kwas sulfono(ditelluroperokso)ditellurowy	(4Te)
-S(O)(S)-OH	*O*-kwas sulfonotiowy	(2O,1S;OH)
-SO_2-SH	*S*-kwas sulfonotiowy	(2O,1S; SH)
-SO_2-SeH	*Se*-kwas sulfonoselenowy	(2O,1 Se; SeH)
-SS_2-OH	*O*-kwas sulfonoditiowy	(1O,2S; OH)
-S(O)(S)-SH	*S*-kwas sulfonoditiowy	(1O,2S; SH)
-S(Se)(Te)-OH	*O*-kwas sulfonoselenotellurowy	(1O,lSe,lTe; OH
-S(O)(Te)-SeH	*Se*-kwas sulfonoselenotellurowy	(1O,lSe,lTe; SeH)
-S(O)(Se)-TeH	*Te*-kwas sulfonoselenotellurowy	(1O,lSe.lTe; TeH)

-S(S_2)-SH	kwas sulfonotritiowy	(3S)
-S(O)(=NH)-OH	kwas sulfonoimidowy	
-S(O)(=NH)-OOH	kwas sulfonoimidoperoksowy	(3O,1N; OO)
-S(S)(=NH)-OOH	*OO*-kwas sulfonoimidoperoksotiowy	(2O,IS,IN; OO; OH)
-S(O)(=NH)-SOH	*OO*-kwas sulfonoimido(tioperoksowy)	(2O,1S,1N; OS; OH)
-S(O)(=NH)-OSH	*OS*-kwas sulfonoimido(tioperoksowy)	(2O,IS,IN; OS; SH)
-S(S)(=NH)-OH	*O*-kwas sulfonoimidotiowy	(1O,1S; OH)
-S(O)(=NH)-SH	*S*-kwas sulfonoimidotiowy	(1O,1S; SH)
-S(S)(=NH)-SH	kwas sulfoimidoditiowy	(2S)
-S(Se)(=NH)-SH	*S*-kwas sulfonoimidoselenotiowy	(lS,lSe; SH)
-S(S)(=NH)-SeH	*Se*-kwas sulfonoimidoselenotiowy	(lS,lSe; SeH)
-S(Te)(=NH)-TeH	kwas sulfonoimidoditellurowy	(2Te)
-S($(=NH)_2$-OH	kwas sulfonodiimidowy	
-S($(=NH)_2$-OOH	sulfonodiimidoperoksowy	(2O,2N; OO)
-S($(=NH)_2$-SOH	*SO*-kwas sulfonodiimido(tioperoksowy)	(1O,1S,2N: OS; OH)
-S($(=NH)_2$-OSH	*OS*-kwas sulfonodiimido(tioperoksowy)	(1O,1S,2N; OS; SH)
-S($(=NH)_2$-SeH	kwas sulfonodiimidoselenowy	(lSe,2N)
-S($(=NH)_2$-TeH	kwas sulfonodiimidotellurowy	(lTe,2N)
-S(O)($(=NNH_2)$-OH	kwas sulfonohydrazonowy	
-S(O)($(=NNH_2)$-OOH	kwas sulfonohydrazonoperoksowy	(3O,INN; OO)
-S(S)($(=NNH_2)$-OOH	kwas sulfonohydrazonoperoksotiowy	(2O,1S,1NN; OO)
-S(S)($(=NNH_2)$-OH	*OS*-kwas sulfonohydrazonotiowy *O*-	(1O,1S,1NN; OH)
-S(O)($(=NNH_2)$-SH	*S*-kwas sulfonohydrazonotiowy	(1O,1S,1NN; SH)
-S($(=NNH_2)_2$OH	kwas sulfonodihydrazonowy	
-S($(=NNH_2)_2$-OOH	kwas sulfonodihydrazonoperoksowy	(2O,2NN; OO)
S($(=NNH_2)_2$-SOH	kwas sulfonodihydrazono(tioperoksowy) 5O-	(1O,1S,2NN; SO, OH)
-S($(=NNH_2)_2$-SH	kwas sulfonodihydrazonotiowy	(1S,2NN)

Tabela 4.4 Kompletna lista przyrostków i analogów tworzonych wg nomenklatury zamiennej funkcji w preferowanych nazwach IUPAC, w malejącym porządku starszeństwa

1. Kwasy karboksylowe	-COOH	kwasy karboksylowe
	-(C)OOH	kwasy – owe
	-CO-OOH	kwas karboperoksowy
	-(C)O-OOH	kwas peroksowy

Kwasy karboperoksowe modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te

	-CS-OOH	kwas karboperoksotiowy
	-(C)S-OOH	kwas peroksotiowy
	-CSe-OOH	kwas karboperoksoselenowy
	-(C)Se-OOH	kwas peroksoselenowy
	-CO-SOH	*SO*-kwas karbo(tioperoksowy)
	-(C)O-SOH	*SO*-kwas (tioperoksowy)
	-CO-OSH	*OS*-kwas karbo(tioperoksowy)
	-(C)O-OSH	*OS*-kwas (tioperoksowy)

Kwasy karboksylowe modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te

	-CS-OH	*O*-kwas karbotiowy
	-(C)S-OH	*O*-kwas tiowy
	-CO-SH	S-kwas karbotiowy
	-(C)O-SH	*S*-kwas tiowy
	-CO-SeH	*Se*-kwas karboselenowy
	-(C)O-SeH	*Se*-kwas selenowy
	-CS-SH	kwas karboditiowy
	-(C)S-SH	kwas ditiowy
2. Kwasy karboksyimidowe	-C(=NH)-OH	kwas karboksyimidowy
	-(C)(=NH)-OH	kwas imidowy
Kwasy karboksyimidoperoksowe	-C(=NH)-OOH	kwas karboksyimidoperoksowy
	-(C)(=NH)-OOH	kwas imidoperoksowy

Kwasy karboksyimidoperoksowe modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te

	-C(=NH)-SOH	*SO*-kwas karboksyimido(tioperoksowy)
	-(C)(=NH)-SOH	*SO*-kwas imido(tioperoksowy)
	-C(=NH)-OSH	*OS*-kwas karboksyimido(tioperoksowy)
	-(C)(=NH)-OSH -	*OS* kwas imido(tioperoksowy)
	-C(=NH)-SSH	kwas karbo(ditioperokso)imidowy
	-(C)(=NH)-SSH	kwas (ditioperokso)imidowy
	-C(=NH)-SeSH -	*SeS* kwas
	-(C)(=NH)-SeSH	karboksyimido(selenotioperoksowy)
		SeS-kwas imido(selenotioperoksowy)

Kwasy karboksyimidowe modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te

	-C(=NH)-SH	kwas karboksyimidotiowy
	-(C)(=NH)-SH	kwas imidotiowy
3. kwasy **k**arbohydrazonowe	-C(=NNH_2)-OH	kwas karbohydrazonowy
	-(C)(=NNH_2)-OH	kwas hydrazonowy
kwasy karbohydrazonoperoksowe	-C(=NNH_2)-OOH	kwas karbohydrazonoperoksowy
	-(C)(=NNH_2)-OOH	kwas hydrazonoperoksowy

Kwasy karbohydrazonoperoksowe modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te

	-C(=NNH_2)-SOH	*OS*-kwas karbohydrazono(tioperoksowy)

	-(C)(=NNH_2)-SOH	*OS*-kwas hydrazono(tioperoksowy)
	-C(=NNH_2)-OSH	*OS*-kwas karbohydrazono(tioperoksowy)
	-(C)(=NNH_2)-OSH	*OS*-kwas hydrazono(tioperoksowy)
	-C(=NNH_2)-TeTeH	kwas karbo(ditelluroperokso)hydrazonowy
	-(C)(=NNH_2)-TeTeH	kwas (ditelluroperokso)hydrazonowy

Kwasy karbohydrazonowe modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te

	-C(=$NHNH_2$)-SH	kwas karbohydrazonotiowy
	-(C)(=$NHNH_2$)-SH	kwas hydrazonotiowy
4. Kwas sulfonowy	-SO_2-OH	kwas sulfonowy
Kwas sulfonoperoksowy	-SO_2-OOH	kwas sulfonoperoksowy

Kwasy sulfonoperoksowe modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te

	-S(O)(S)-OOH	kwas sulfonoperoksotiowy
	-SO_2-SOH	*SO*-kwas sulfono(tioperoksowy)
	-SO_2-OSH	*OS*-kwas sulfono(tioperoksowy)
	-SS_2-OOH	kwas sulfonoperoksoditiowy

Kwasy sulfonowe modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te

	-SO_2-SH	*S*-kwas sulfonotiowy
	-S(O)(S)-OH	*O*-kwas sulfonotiowy
	-S(S)(S)-SH	kwas sulfonotritiowy
5. Kwas sulfonimidowy	-S(O)(=NH)-OH	kwas sulfonimidowy
Kwas sulfonimidoperoksowy	-S(O)(=NH)-OOH	kwas sulfonimidoperoksowy

Kwasy sulfonowe modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te

	-S(O)(=NH)-SOH	*SO*-kwas sulfonoimido(tioperoksowy)
	-S(O)(=NH)-OSH	*OS*-kwas sulfonoimido(tioperoksowy)

Kwasy sulfonoimidowe modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te

	-S(O)(=NH)-SH	*S*-kwas sulfonoimidotiowy
6. Kwasy sulfonodiimidowy	-S(=$NH)_2$-OH	kwas sulfonodiimidic
Sulfonodiimidoperoksowe	-S(=$NH)_2$-OOH	kwas sulfonodiimidoperoksowy

Kwasy sulfonodiimidoperoksowe modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te

	-S(=$NH)_2$-SOH	*SO*-kwas sulfonodiimido(tioperoksowy)
	-S(=$NH)_2$-OSH	*OS*-kwas sulfonodiimido(tioperoksowy)

Kwasy sulfonodiimidowe modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te

	-S(=$NH)_2$-SeH	kwas sulfonodiimidoselenowy
7. Kwasy sulfonohydrazonowe	-S(O)(=NNH_2)-OH	kwas sulfonohydrazonowy
Kwas sulfono-hydrazonoperoksowy	-S(O)(=NNH_2)-OOH	kwas sulfonohydrazonoperoksowy

Kwasy sulfonohydrazonoperokswe modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te

	-S(S)(=NNH_2)-OOH	kwas sulfonohydrazonoperoksotiowy

Kwasy sulfonohydrazonowe modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te

	-S(S)(=NNH_2)-OH	kwas sulfonohydrazonotiowy O-
	-S(O)(=NNH_2)-SH	kwas sulfonohydrazonotiowy S-
8. Kwasy **s**ulfonodihydrazonowe	-S(=NNH_2)$_2$-OH	kwas sulfonodihydrazonowy
Kwasy sulfono-dihydrazonoperoksowe	S(=NNH_2)$_2$- OOH	kwas sulfonodihydrazonoperoksowy

Kwasy sulfonodihydrazonoperoksowe modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te

	-S(=NNH_2)$_2$-SOH	kwas sulfonodihydrazono(tioperoksowy) SO

Kwasy sulfonodihydrazonoperoksowe modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te

	-S(=NNH_2)$_2$-SH	kwas sulfonodihydrazonotiowy
9. Kwasy sulfinowe	-SO-OH	kwas sulfinowy
Kwas sulfinoperoksowy	-SO-OOH	kwas sulfinoperoksowy

Kwasy sulfinoperoksowe modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te

	-S(O)(S)-OOH	kwas sulfinoperoksotiowy
	-SO-SOH	kwas sulfino(tioperoksowy) SO
	-SO-OSH	sulfino(tioperoksowy) OS

Kwasy sulfinowe modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te

	-SS-OH	kwas sulfinotiowy *O*-
	-SO-SeH	kwas sulfinoselenowy *Se*-
10. Kwasy sulfinimidowe	-S(=NH)-OH	kwas sulfinimidowy
Kwas sulfinoimidoperoksowy	-S(=NH)-OOH	kwas sulfinimidoperoksowy

Kwasy sulfinoimidoperoksowe modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te

	-S(=NH)-OSH	kwas sulfinimido(tioperoksowy) OS

Kwasy sulfinoimidowe modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te

11. Kwasy sulfinohydrazonowe	S(=NNH_2)-OH	kwas sulfinohydrazonowy
Kwasy sulfino-hydrazonoperoksowe	S(=NNH_2)- OOH	kwas sulfinohydrazonoperoksowy

Kwasy sulfinohydrazonoperoksowe modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te

	-S(=NNH_2)-SSeH	kwas sulfinohydrazono(selenotioperoksowy) SSe

Kwasy sulfinohydrazonowe modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te

	-S(=NNH_2)-TeH	kwas sulfinohydrazonotellurowy
12. Kwasy selenowe	-SeO_2-OH	kwas selenonowy (jak dla kwasów sulfonowych)

13. Kwasy seleninowe	-SeO-OH	kwas seleninowy (jak dla kwasów sulfinowych)
14. Kwasy telluronowe	-TeO_2-OH	kwas telluronowy (jak dla kwasów sulfonowych)
15. Kwasy tellurinowe	-TeO-OH	kwas tellurinowy (jak dla kwasów sulfinowych)
16. Karboksyamidy	-CO-NH_2	karboksyamid
	-(C)O-NH_2	amid
Karboamidy modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te		
	-CS-NH_2	karbotioamid
	-(C)S-NH_2	tioamid
17. Karboksyimidoamidy	-C(=NH)-NH_2	karboksyimidoamid
	-(C)(=NH)-NH_2	imidoamid
18. Karbohydrazonoamidy	-C(=NNH_2)-NH_2	karbohydrazonoamid
	-(C)(=NNH_2)-NH_2	hydrazonoamid
19. Sulfonoamidy	-SO_2-NH_2	sulfonoamid
Sulfonoamidy modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te		
	-S(O)(S)-NH_2	sulfonotioamid
	-S(S)(Se)-NH_2	sulfonoselenotioamid
20. Sulfonimidamides	-S(O)(=NH)-NH_2	sulfonimidamid
Sulfonoimidoamidy modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te		
	-S(S)(=NH)-NH_2	sulfonoimidotioamid
21. Sulfonodiimidoamidy	-S(=$NH)_2$-NH_2	sulfonodiimidamid
22. Sulfonohydrazonoamidy	-S(O)(=NNH_2)-NH_2	sulfonohydrazonoamid
Sulfonohydrazonoamidy modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te		
	-S(S)(=NH)-NH_2	sulfonohydrazonotioamid
23. Sulfono-dihydrazonoamidy	-S(=$NNH_2)_2$-NH_2	sulfonodihydrazonoamid
24. Sulfinoamidy	-SO-NH_2	sulfinamid
Sulfinodihydrazonoamidy modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te		
	-S(Se)-NH_2	sulfinoselenoamid
25. Sulfinoimidoamidy	-S(=NH)-NH_2	sulfinoimidoamid
26. Sulfinohydrazonoamidy	-S(=NNH_2)-NH_2	sulfinohydrazonamid
27. Selenonamidy	-SeO_2-NH_2	selenonamid (jak dla sulfonoamidów)
28, Seleninoamidy	SeO-NH_2	seleninoamid (jak dla sulfinamidów)
29. Telluronoamidy	TeO_2-NH_2	telluronoamid (jak dla sulfonoamidów)
30. Tellurinoamidy	TeO-NH_2	tellurinoamid (jak dla sulfinoamidów)

31. Karbohydrazydy	-CO-$NHNH_2$	karbohydrazid
	-(C)O-$NHNH_2$	hydrazyd
Karbohydrazydy modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te		
	CS-$NHNH_2$	karbotiohydrazyd
32. Karboksy-imidohydrazydy	-C(=NH)-$NHNH_2$	karboksyimidohydrazyd
	-(C)(=NH)-$NHNH_2$	imidohydrazyd
33. Karbo-hydrazonohydrazydy	-C(=NNH_2)-$NHNH_2$	karbohydrazonohydrazd
	-(C)(=NNH_2)-$NHNH_2$	hydrazonohydrazyd
34. Sulfonohydrazydy	-SO_2-$NHNH_2$	sulfonohydrazyd
Sulfonohydrazydy modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te		
	-S(O)(S)-$NHNH_2$	sulfonotiohydrazyd
35. Sulfonoimidohydrazydy	-S(O)(=NH)-$NHNH_2$	sulfonoimidohydrazyd
Sulfonoimidohydrazydy modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te		
	-S(Se)(=NH)-$NHNH_2$	sulfonoimidoselenohydrazyd
36.Sulfono-diimidohydrazydy	-S(=$NH)_2$-$NHNH_2$	sulfonodiimidohydrazyd
37. Sulfono hydrazonohydrazyd	S(O)(=NNH_2)-$NHNH_2$	sulfonohydrazonohydrazyd
Sulfonohydrazonohydrazydy modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te		
	-S(Te)(=$NNH_2)_2$-$NHNH_2$	sulfonohydrazonotellurohydrazyd
38. Sulfono-dihydrazonohydrazydy	-S(=NNH_2)-$NHNH_2$	sulfonodihydrazonohydrazyd
39. Sulfinohydrazydy	-S(O)-$NHNH_2$	sulfinohydrazyd
Sulfinohydrazydy modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te		
	-S(Se)-$NHNH_2$	sulfinoselenohydrazyd
40. Sulfinoimidohydrazydy	-S(=NH)-$NHNH_2$	sulfinoimidohydrazyd
41. Sulfmo-hydrazonohydrazydy	-S(=NNH_2)-$NHNH_2$	sulfinohydrazonohydrazyd
42. Selenonohydrazydy	-SeO_2-$NHNH_2$	selenonohydrazyd (jak dla sulfonohydrazydów)
43. Seleninohydrazydy	-Se(O)-$NHNH_2$	seleninohydraztd (jak dla sulfinohydrazydów)
44. Telluronohydrazydy	-TeO_2-NHNH	telluronohydrazyd (jak dla sulfonohydrazydów)
45. Tellurinohydrazydy	-Te(O)-$NHNH_2$	tellurinohydrazyd (jak dla sulfinohydrazydó a)

46. Nitryle	-CN	karbonitryl
	-(C)N	nitryl
47. Aldehydy	-CHO	karboaldehyd
	-(C)HO	al

Aldehydy modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te

-CHS	karbotioaldehyd
-(C)HS	tial
-CHSe	karboselenoaldehyd
-(C)HSe	selenal
-CHTe	karbotelluroaldehyd
-(C)HTe	tellural

48. Ketony, pseudoketony, i heterony	>(C)=O	on

Ketony, pseudoketony i heterony modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te

>(C)=S	tion
>(C)=Se	selon (nie selenon)
>(C)=Te	tellon (nie telluron)

49. Związki hydroksy	-OH	ol

Związki hydroksylowe modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te

-SH	tiol
-SeH	selenol
-TeH	tellurol

50. Hydroperoksydy	-OOH	peroksol

Związki hydroksyloperoksowe modyfikowane zamianą przez S, Se, i/lub Te

-OSH	OS-tioperoksol
-SOH	SO-tioperoksol (nie kwas sulfenowy)

51. Aminy	$-NH_2$	amina
52. Iminy	=NH	imina

P-44 PORZĄDEK STARSZEŃSTWA STRUKTUR MACIERZYSTYCH

Strukturę macierzystą zdefiniowano (P-15.1) jako macierzysty wodorek, na przykład metan, sfunkcjonalizowany macierzysty wodorek, na przykład cykloheksanol, lub związek o macierzystych funkcjach, na przykład, kwas octowy. Wybór preferowanej nazwy IUPAC opartej na zasadzie starszeństwa struktury macierzystej jest opisany w P-45.

P-44.0 Wprowadzenie
P-44.1 Kolejność starszeństwa struktur macierzystych
P-44.2 Kolejność starszeństwa wyłącznie dla pierścieni i systemów pierścieniowych
P.44.3 Starszeństwo łańcuchów acyklicznych (łańcuch główny)
P-44.4 Kryteria starszeństwa stosowane wobec pierścieni, układów pierścieni lub łańcuchów acyklicznych.

P-44.0 WPROWADZENIE

Wybór preferowanej struktury macierzystej oparty jest na starszeństwie klas (patrz P-41), które w pierwszym rzędzie daje pierwszeństwo grupom charakterystycznym, wyrażanym jako przyrostki, a następnie - macierzystym wodorkom, wówczas gdy występują różne klasy. Sekcja P-44.1 obejmuje wybór preferowanej struktury macierzystej wówczas gdy występują różne klasy oraz wybór pomiędzy pierścieniami i łańcuchami w obrębie tej samej klasy. Kiedy trzeba dokonać wyboru pomiędzy cyklicznymi wodorkami macierzystymi, wybiera się najstarszy pierścień lub układ pierścieniowy zgodnie z kolejnością starszeństwa pierścieni i układów pierścieniowych (patrz P-44.2). Kiedy występuje wybór pomiędzy acyklicznym wodorkami macierzystymi należy wskazać łańcuch główny (patrz P-44.3). Te trzy porządki starszeństwa: klas, pierścieni oraz układów pierścieniowych i głównego łańcucha, są wyrażone w ogólnym porządku starszeństwa zwanym ‘porządkiem starszeństwa struktur macierzystych’. Sekcja P-44.4 zawiera kryteria wyboru starszej struktury macierzystej stosujące się do pierścieni, układów pierścieniowych bądź łańcuchów acyklicznych.

W związku z preferowanymi nazwami konieczne było gruntowne przejrzenie i rozszerzenie porządku starszeństwa klas, pierścieni oraz układów pierścieniowych i wyboru głównego łańcuch. Niniejszy przegląd zawiera zasadnicze zmiany zaleceń z wydania z roku 1979 (odnośnik 1) i Przewodnika z 1993 roku (odnośnik 2).

Zmienione zostały wcześniejsze zalecenia dotyczące porządku starszeństwa pomiędzy nienasyceniem i długością łańcuch w acyklicznych strukturach macierzystych. Tak więc, pierwszym kryterium uwzględnianym przy wyborze preferowanego acyklicznego łańcucha macierzystego jest długość łańcucha; drugim kryterium jest nienasycenie.

Uwaga 1 Ponieważ starsza struktura macierzysta może w związku występować w wielu postaciach, może być utworzony szereg pozornie słusznych, jednoznacznych nazw. Kryteria niezbędne do wyboru preferowanej nazwy IUPAC opisano w P-45; a zatem, tradycyjne kryteria zawiązane z podstawnikami nie zostały włączone do tej sekcji.

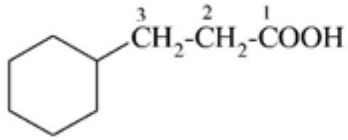
Uwaga 2: Kryteria związane z niestandardowymi wiązaniami zostały włączone do kryteriów stosujących się pierścieni, układów pierścieniowych bądź acyklicznych łańcuchów (P-44.4); hierarchicznie występują one po kryteriach związanych z nienasyceniem (podwójne wiązania) i przed kryteriami związanymi z wskazanymi atomami wodoru.

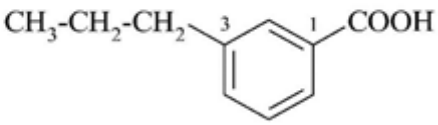
P-44.1 PORZĄDEK STARSZEŃSTWA STRUKTUR MACIERZYSTYCH

Gdy występuje możliwość wyboru, starszą strukturę macierzystą wybiera się stosując następujące kryteria, po kolei, aż do osiągnięcia rozstrzygnięcia. Kryteria te muszą być zawsze stosowane przed kryteriami stosowanymi do pierścieni oraz układów pierścieniowych (patrz P-44.2) i łańcuchów (patrz P-44.3). Następnie rozważa się kryteria stosowane do łańcuchów i pierścieni lub systemów pierścieniowych podane w P-44.4.

P-44.1.1 Starsza struktura macierzysta ma najwyższą liczbę podstawników odpowiadających głównej grupie charakterystycznej (przyrostek) lub jest starszym wodorkiem macierzystym w zgodności z starszeństwem klas (P-41) i starszeństwem przyrostków (P-43).

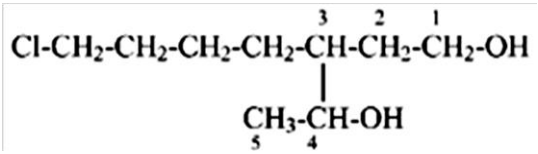
Przykłady:





kwas 3-cykloheksylopropanowy (PIN)
kwas cykloheksanopropanowy (patrz P-15.6)

kwas 3-propylobenzoesowy (PIN)

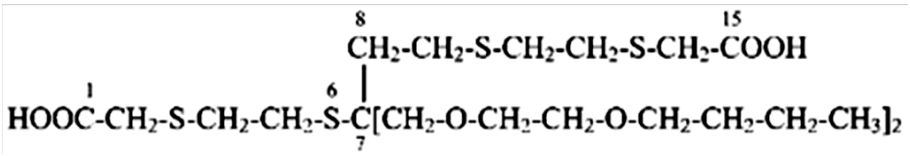


3-(4-chlorobutylo)pentano-1,4-diol (PIN)
[nie 7-chloro-3-(l-hydroksyetylo)heptan-l-ol; zestaw lokantów ‘1,4’ dla głównych grup charakterystycznych jest niższy niż ‘2,5’]

H_2N-NH-COOH — kwas hydrazynokarboksylowy (PIN)

H_3Si-CH_2-CH_2-COOH — kwas 3-sililopropanowy (PIN)

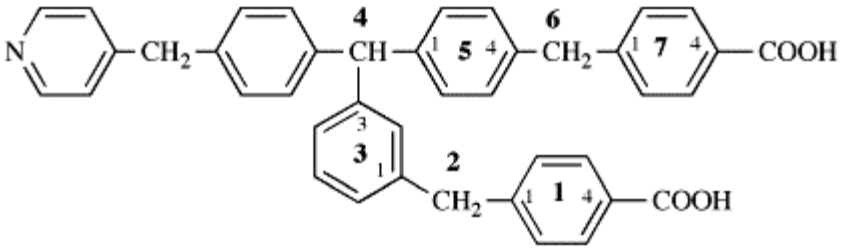
HOOC-SiH_2-CH_2-CH_3 — kwas etylsilanokarboksylowy (PIN)



kwas 7,7-bis[(2-butoksyetoksy)metylo]-3,6,10,13-tetratiapentadekano-1,15-diowy (PIN)
[nie kwas 9-[(2-butoksyetoksy)metylo]-9-({2-[(karboksymetylo)sulfanylo]etylo}sulfanylo)-11,14-dioksa-3,6-ditiaoktadekan-1-owy; ani kwas 7-[(2-butoksyetoksy)metylo]-7-[2-({2-[(karboksymetylo)sulfanylo]ethylo}sulfanylo)ethylo]-9,12-dioksa-3,6-ditiaheksadekan-1-owy; w PIN występują dwie główne grupy charakterystyczne, a w pozostałych nazwach – tylko jedna]

H_3Si-CH_2-CH_2-SiH_2-CH_2-CH_2-SiH_3

[silanodiylodi(etano-2,1-diylo)]bis(silan) (PIN)
(Si jest starszy od C, patrz P-44.1.2)
[nie bis(2-silyloetyl)silan; preferowana nazwa multiplikacyjna wyraża obecność dwóch macierzystych wodorków silanu; nazwa podstawnikowa – tylko jedną]



kwas 4-{4-[(pirydyn-4-ylo)methylo)fenylo}-l,7(1),3(1,3),5(1,4)4-tetrabenzenaheptafano-l^4,7^4-dikarboksylowy (PIN)

[nie kwas 4-{[3-(3-karboksyfenylo)metylo]fenylo}-l(4)-pirydyno-7(l),3(l,4),5(l,3)-tribenzenaheptafano-7^4-karboksylowy; w PIN występują dwie główne grupy charakterystyczne, a w pozostałych nazwach – tylko jedna]

P-44.1.2 Starsza struktura macierzysta, cykliczna czy też acykliczna, ma starszy atom, w zgodności ze starszeństwem klas (patrz P-41), wyrażony poprzez następujący, malejący porządek pierwiastków: N > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al > Ga > In > Tl > O > S > Se > Te > C. To kryterium stosuje się do wyboru najstarszego atomu w strukturze macierzystej i do wyboru pomiędzy pierścieniami i łańcuchami. Nie stosuje się go w do wyboru pomiędzy pierścieniami lub do wyboru głównego łańcucha zmodyfikowanego zamianą szkieletu (‘a’). Jeśli najstarsza klasa jest układem pierścieni lub łańcuchem zmodyfikowanym nomenklaturą (‘a’) zamiany szkieletu, najstarsza struktura macierzysta jest wybierana, odpowiednio, spośród wszystkich pierścieni (patrz P-44.2) lub łańcuchów (patrz P-44.3).

P-44.1.2.1 Kiedy dwa lub więcej atomów oznaczających różne klasy jest zawartych w związku, i kiedy trzeba dokonać wyboru związku macierzystego pomiędzy tymi atomami, związkiem macierzystym jest ten, który należy do klasy wymienionej najpierw w starszeństwie klas podanym powyżej. Pojedynczy najstarszy atom wystarcza aby nadać starszeństwo macierzystemu wodorkowi.

Ta reguła jest szersza od Reguły D-1.34 w wydaniu z 1979 (odnośnik 1), która odnosiła się do związków, gdzie heteroatomy były związane ze sobą bezpośrednio,

Przykłady:

$Si(CH_3)_4$

tetrametylosilan (PIN)
(Si jest starszy C)

$A1(CH_2\text{-}CH_3)_3$

trietyloaluman (PIN)
(Al jest starszy od C)

$CH_3\text{-}PH\text{-}SiH_3$

metylo(sililo)fosfan (PIN)
(P jest starszy od Si lub C)

$HS\text{-}S\text{-}S\text{-}S\text{-}S\text{-}SiH_2\text{-}SiH_2\text{-}SiH_3$

1–pentasulfanylotrisilan (nazwa wstępnie wybrana)
(Si jest starszy od S)

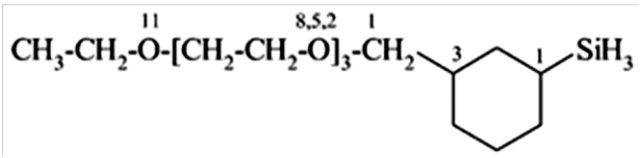
Uwaga: grupa HS- na końcu siarkowego łańcucha nie występuje w postaci przyrostka; patrz P-21.2.2.

$H_3Si\text{-}SiH_2\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}PH_2$

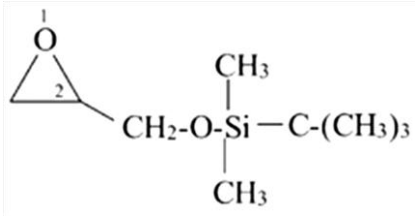
(2-disilanyloetylo)fosfan (PIN)
(P jest starszy od Si)

$H_2Sb\text{-}CH_2\text{-}AsH_2$

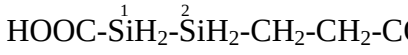
(stybanylometyl)arsan (PIN)
(As jest starszy od Sb)



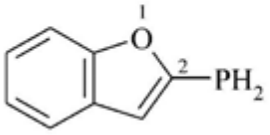
[3-(2,5,8,l l-tetraoksotridekan-l-ylo)cykloheksylo]silan (PIN)
(Si jest starszy od O, a oba - od C)



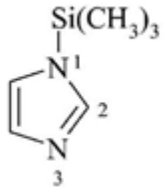
tert-butylo(dimetylo)(oksiran-2-ylometoksy)silan (PIN)
(Si jest starszy od O)



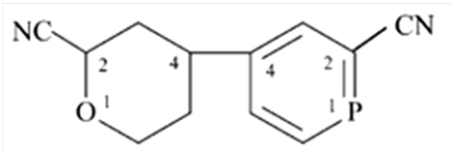
kwas 2-(2-karboksyetylo)disilano-l-karboksylowy (PIN)
(Si jest starszy od C)



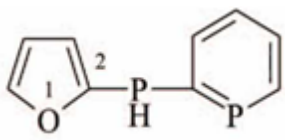
(l-benzofuran-2-ylo)fosfan (PIN)
(P jest starszy od O)



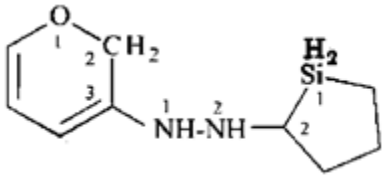
l-(trimetylsililo)-l*H*-imidazol (PIN)
(N jest starszy od Si)



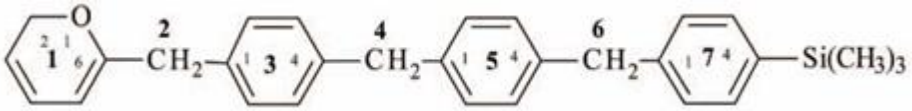
4-(2-cyjanofosfinin-4-ylo)oksano-2-karbonitryl (PIN)
(O > P; patrz P-44.2; P-44.1.2 nie może służyć do
wyboru najstarszego związek macierzystego)



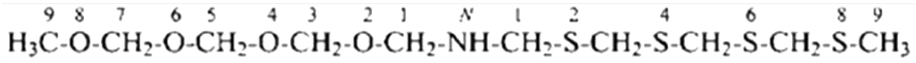
2-[(fosfinan-2-ylo)fosfanylo]furan (PIN)
(pierścień P jest starszy od łańcucha P;
pierścień O jest starszy od pierścienia P



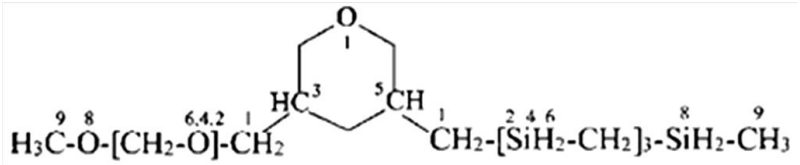
1 -(2*H*-piran-3-ylo)-2-(silolan-2-ylo)hydrazyna (PIN)
(N > Si > O)



trimetylo[1^{2}*H*-l(6)-pirana-3,5(l,4),7(l)-tribenzenaheptafan-7^{4}-ylo]silan (PIN)
(Si jest starszy od O)



N-(2,4,6,8-tetratianonan-1-ylo)-2,4,6,8-tetraoksanonano-1-amina (PIN)
(O > S; patrz P-44.3; P-44.1.2 nie może służyć do
wyboru starszego związek macierzysty)



1 -[5-(2,4,6,8-tetrasilanonan-1-ylo)oksan-3-ylo]-2,4,6,8-tetraoksanonan (PIN)
[łańcuch O > łańcucha Si (patrz P-44.3); P-44.1.2 nie może służyć
do wyboru najnajstarszego związek macierzystego)

P-44.1.2.2 Systemy utworzone z pierścieni i łańcuchów (z wyłączeniem liniowych fanów)

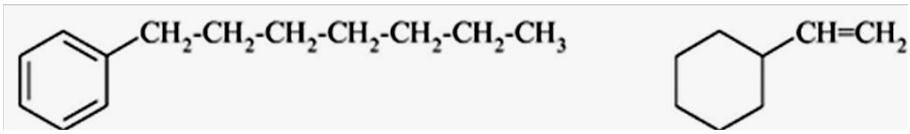
Przyjęte są dwie metody nazywania systemów utworzonych z pierścieni i łańcuchów (z wyłączeniem liniowych fanów).

(1) W obrębie tej samej klasy pierścień lub układ pierścieni są starsze od łańcucha. Kiedy pierścień i łańcuch zawierają ten sam pierwiastek, pierścień ma pierwszeństwo przy wyborze związku macierzystego. Pierścienie i łańcuchy wybierane są niezależnie od ich stopnia uwodorowania. W konsekwencji, to podejście preferuje wybór pierścienia przed łańcuchem w systemach utworzonych z cyklicznych i acyklicznych węglowodorów.

(2) Z kontekstu wynika, że może być przedkładany albo pierścień albo łańcuch, tak że, na przykład, podstawniki mogą być traktowano tak samo lub nienasycona struktura może być wzięta pod uwagę albo wybrana jako mająca największą liczbę atomów w szkielecie pierścienia albo głównym łańcuchu struktury acyklicznej.

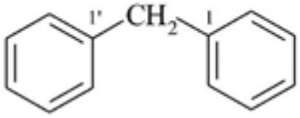
W przykładach, gdy możliwa jest alternatywa, podano nazwy tworzone obiema metodami. Wybór preferowanej nazwy IUPAC patrz P-52.2.8.

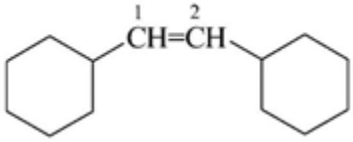
Przykłady:



(1) heptylobenzen (PIN)
(pierścień jest starszy od łańcucha)
(2) 1-fenyloheptan
(łańcuch ma większą liczbę szkieletowych atomów)

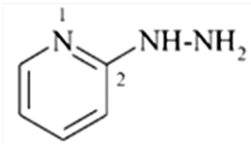
(1) etenylocykloheksan (PIN)
(pierścień jest starszy od łańcucha)
(2) cykloheksyloeten
(akcentuje nienasycenie)



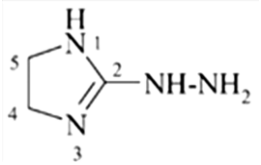


(1) 1,1′-metylenodibenzen (PIN)
(pierścień jest starszy od łańcucha)
(2) difenylometan
(traktuje grupę fenylową jako podstawnik)

(1) 1,1′-(eteno-1,2-diylo)dicykloheksan (PIN)
(pierścień jest starszy od łańcucha)
(2) 1,2-dicykloheksyloeten
(akcentuje nienasycenie)



(1) 2-hydrazynylopirydyna **(**PIN**)**
(pierścień jest starszy od łańcucha)
(2) l-(pirydyn-2-ylo)hydrazyna
1-(pirydyn-2-ylo)diazan



(1) 2-hydrazynylo-4,5-dihydro-l*H*-imidazol (PIN)
2-hydrazyno-4,5-dihydro-l*H*-imidazol
(pierścień jest starszy od łańcucha)
(2) (4,5-dihydro-l*H*-imidazol-2-ylo)hydrazyna

P-44.1.3 Porządek starszeństwa wyłącznie dla pierścieni i układów pierścieni. Kryteria stosowane gdy strukturę macierzystą wybiera się pomiędzy dwoma lub większą liczbą pierścieni lub układów pierścieni podano w P-44.2.

P-44.1.4 Starszeństwo pomiędzy acyklicznymi łańcuchami (łańcuch główny). Kryteria, które stosuje się gdy strukturę macierzystą wybiera się pomiędzy dwoma lub większą liczbą acyklicznych łańcuchów podano w P-44.3.

P-44.1.5 Kryteria stosowane do pierścieni, układów pierścieni lub acyklicznych łańcuchów, takich jak nienasycenie, obecność atomów szkieletowych o różnej wiązalności, związki izotopowo zmodyfikowane i konfiguracje stereochemiczne są podane w P-44.4.

P-**44.2** PORZĄDEK STARSZEŃSTWA TYLKO DLA PIERŚCIENI I UKŁADÓW PIERŚCIENI

P-**44.2.1** Kryteria ogólne dla wszystkich pierścieni i systemów pierścieniowych (innych niż fany, zarówno cyklicznych jak i liniowych, dla których kryteria zawarte są w P-44.2.2.2.2 i P-44.2.2.2.6, odpowiednio).

P-44.2.2 Kryteria specyficzne dla szczególnych rodzaju pierścienia i systemu pierścieniowego.

P-44.2.1 Jeśli zastosowanie P-44.1 nie skutkuje wyborem, stosuje się ogólne kryteria ustalania starszeństwa pierścieni podane poniżej, aż do osiągnięcia jednoznaczności. Najpierw podano listę tych kryteriów, a następnie zilustrowano w podrozdziałach od P-44.2.1.2. do P-44.2.1.8.

Starszeństwo pierścieni lub systemów pierścieniowego:

(a) heterocyklicznego;

(b) zawiera conajmniej jeden atom azotu;

(c) zawiera conajmniej jeden heteroatom (przy nieobecności azotu), występujący wcześniej w następującej kolejności: F > Cl > Br > I > O > S > Se > Te > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al > Ga > In > Tl;

(d) zawiera większą liczbę pierścieni;

(e) zawiera większą liczbę atomów szkieletowych;

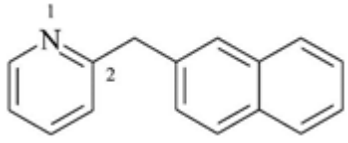
(f) zawiera większą liczbę heteroatomów jakiegokolwiek rodzaju;

(g) zawiera większą liczbę heteroatomów występujących wcześniej w kolejności podanej powyżej w (c).

P-44.2.1.1 Ogólna metodologia

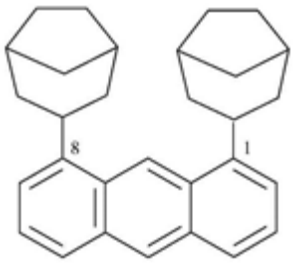
Zastosowanie P-44.2, wówczas gdy korzystanie z P44.1 nie doprowadziło do jednoznacznej konkluzji, możliwe jest wówczas gdy w związku nie występują grupy charakterystyczne lub ta sama ilość grup charakterystycznych występuje we wszystkich porównywanych strukturach cyklicznych. W poniższych przykładach, w całym P.44.2, starszeństwo jest zaznaczone symbolem ‘>’, który należy odczytać jako ‘starszy od’. W przypadku większych struktur fraza ‘jest starszy od’ jest wymieniana pomiędzy starszą strukturą i młodszą strukturą.

Przykłady:



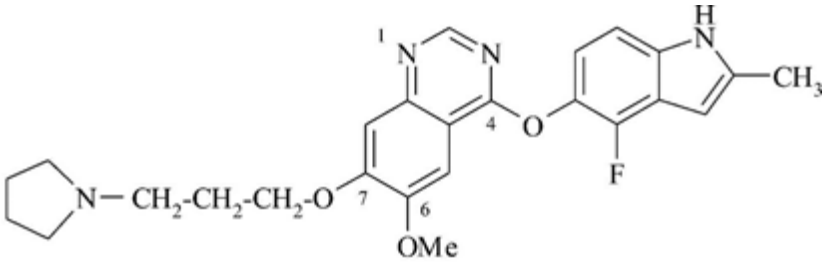
2-[(naftalen-2-ylo)metylo]pirydyna (PIN)
(pirydyna > naftalen)

Objaśnienie: W tym związku brak jest grup charakterystycznych wskazywanych przyrostkiem. Musi być wybrany jeden pierścień, który posłuży jako wodorek macierzysty; pozostałe pierścienie będą wyrażane przyrostkami dodanymi do nazwy wodorku macierzystego. Muszą być zastosowane kryteria P-44.2.1, po kolei poczynając od (a) aż do uzyskania jednoznaczności. W tym przypadku zastosowanie pierwszego kryterium (a) prowadzi do jednoznaczności: pierścień zawierający atom azotu wybrany jest jako wodorek macierzysty; naftalenowy system pierścieniowy jest wymieniony jako podstawnik.



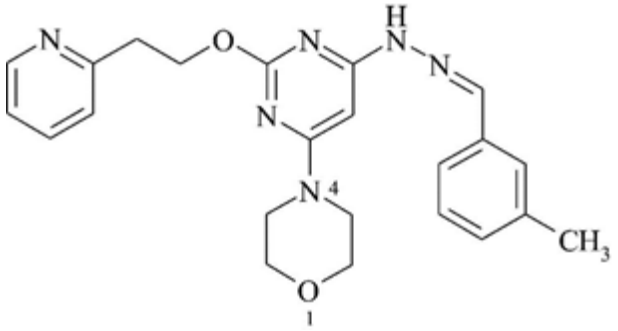
l,8-di(bicyklo[3.2.1]oktan-3-ylo)antracen (PIN)

Objaśnienie: W tym związku brak jest grup charakterystycznych wskazywanych przyrostkiem. Jeden pierścień musi być wybrany jako pierścień starszy, który posłuży jako wodorek macierzysty, ten drugi pierścień zostanie wskazany przyrostkiem nazwy macierzystego wodorku. Kryteria P-44.2.1 muszą być zastosowane po kolei poczynając od (a) aż do uzyskania jednoznaczności. I w tym przypadku zastosowanie kryterium (d) prowadzi do decyzji: antracen ma więcej pierścieni i jest strukturą macierzystą, pierścień bicykliczny wymieniony jako podstawnik.



4-[(4-fluoro-2-metylo-l*H*-indol-5-ylo)oksy]-6-metoksy-7-[3-(pirolidyn-l-ylo) propoksy]chinazolina (PIN)
(chinazolina > indol > pyrolidyna)

Wyjaśnienie: W tym związku występują dwa układy pierścieni i jeden pierścień. Brak grup charakterystycznych wyrażanych przyrostkiem. Na tym etapie charakterystyczne grupy wyrażane przyrostkami są pomijane. Po zastosowaniu kryteriów (a), (b) i (d) z P-44.2.1, system pierścieniowy ‘chinazolina’ wybiera się jako wodorek macierzysty. I ostatecznie kryterium (e) pozwala na uzyskanie jednoznaczności wobec ‘chinazolina’ i ‘indol’. ‘Chinazolina’ jest wodorkiem macierzystem, a indol i pyrolidyna podstawnikami wyrażonymi przyrostkami.



4-(6- {2-[(3-metylofenylo)metylideno]hydrazyn-1-ylo} -2-[2-(pirydyn-2-ylo)etoksy]pirymidyn-4-ylo)morfolina (PIN)
(morfolina > pirymidyna > pirydyna > benzen)

Objaśnienie: W tym związku ‘morfolina’ jest wodorkiem macierzystym, bowiem wybór najstarszego pierścienia może być dokonany dopiero po wykorzystaniu kryterium (f) w P-44.2.1. Pierścienie: benzenowy, pirydynowy i pirymidynowy wskazane są przyrostkami podstawnikowymi.

P-44.2.1.2 Najstarszym pierścieniem lub układem pierścieni jest związek heterocykliczny [kryterium (a) w P-44.2.1]

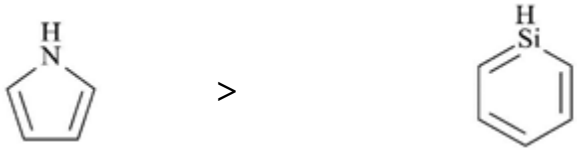
Przykład (symbol > oznacza ‘starszy od’):

chinolina (PIN) antracen (PIN)

P-44.2.1.3 Najstarszy pierścień lub układ pierścieni ma co najmniej jeden atom azotu w pierścieniu [kryterium (b) w P-44.2.1].

Przykłady (symbol > oznacza ‘starszy od’):

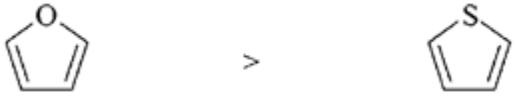
1*H*-pirol (PIN) 2*H*-1-benzopyran (PIN)
2*H*-chromen



1*H*-pirol (PIN) silin (PIN)

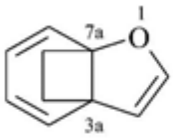
P-44.2.1.4 Najstarszy pierścień lub układ pierścieni zawiera co najmniej jeden heteroatom (przy nieobecności azotu), występujący wcześniej w następującym szeregu: F > Cl > Br > I > O > S > Se > Te > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al > Ga > In > Tl; [kryterium (b) w P-44.2.1].

Przykłady (symbol > oznacza ‘starszy od’):

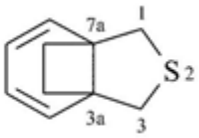


furan (PIN) tiofen (PIN)

[O > S]

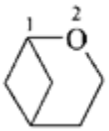


>

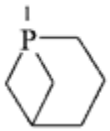


3a,7a-etano-l-benzofuran (PIN) l*H*,3*H*-3a,7a-etano-2-benzotiofen (PIN)

[O > S]



>

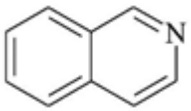


2-oksabicyklo[3.1.1]heptan (PIN) l-fosfabicyklo[3.1.1]heptan (PIN)

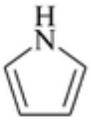
[O > P]

P-44.2.1.5 Starszy pierścień lub układ pierścieni zawiera większą liczbę pierścieni; [kryterium (d) w P-44.2.1].

Przykład (symbol > oznacza ‘starszy od’):



>

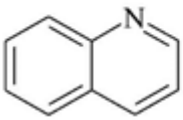


izochinolina (PIN) l*H*-pirol (PIN)

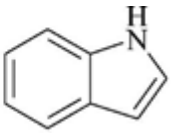
[2 pierścienie > 1 pierścień]

P-44.2.1.6 Starszy pierścień lub układ pierścieni ma większą ilość atomów szkieletowych [kryterium (e) w P-44.2.1].

Przykłady(symbol > oznacza ‘starszy od’):

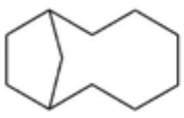


>

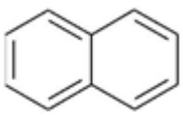


chinolina (PIN) 1*H*-indol (PIN)

[szkielet 10 atomowy > szkielet 9 atomowy]



>



bicyclo[6.2.1]undekan (PIN) naftalen (PIN)

[szkielet 11 atomowy > szkielet 10 atomowy]

Uwaga: Z powodu hierarchicznego charakteru kryteriów, kryterium odnoszące się do liczby atomów szkieletowych wypiera P-44.2.2.2, który przedkłada skondensowany pierścień nad pierścień skondensowany z mostkiem.

bifenylen (PIN) > 1,4-metanonaftalen (PIN)

[szkielet 12 atomowy > 11 szkielet atomowy]

P-44.2.1.7 Starszy pierścień lub układ pierścieni ma większą liczbę heteroatomów jakiegokolwiek rodzaju [kryterium (f) w P-44.2.1].

Przykłady (symbol > oznacza ‘starszy od’):

(1)

2,5,7-trioksabicyklo[4.1.1]oktan (PIN) > 2-oksabicyklo[4.1.1]oktan (PIN)

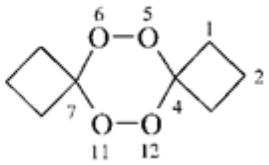
[3 heteroatomy > 1 heteroatomu]

(2)

cynnolina (PIN) > cyklopenta[c]azepin (PIN)

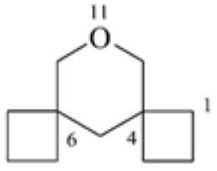
[2 heteroatomy > 1 heteroatomu]

(3)



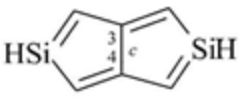
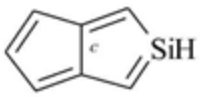
5,6,11,12-tetraoksadispiro[3.2.3.2]dodekan (PIN)

jest starszy od



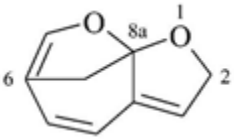
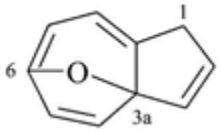
l-oksadispiro[3.1.3^{6}.3^{4}]dodekan (PIN)

[4 heteroatomy > 1 heteroatom]

(4)  > 

silolo[3,4-c]silol (PIN) cyklopenta[c]silol (PIN)

[2 heteroatomy > 1 heteroatom]

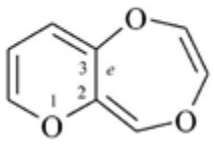
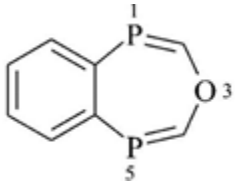
(5)  > 

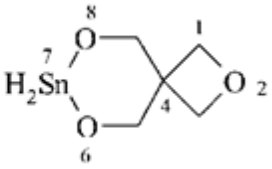
2*H*-6,8a-metanofuro[2,3-*b*]oksepin (PIN) l*H*-3a,6-epoksyazulen (PIN)

[2 heteroatomy > 1 heteroatom]

P-44.2.1.8 Najstarszy pierścień lub układ pierścieni ma większą liczbę heteroatomów występujący wcześniej w następującym szeregu: F > Cl > Br > I > O > S > Se > Te > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al > Ga > In > Tl;

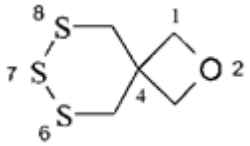
Przykłady (symbol > oznacza ‘starszy od’) :

(1)  > 

(2) 

2,6,8-dioksa-7-stanaspiro[3.5]nonan (PIN)

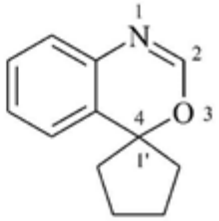
jest starszy od



2-oksa-6,7,8-tritiaspiro[3.5]nonan (PIN)

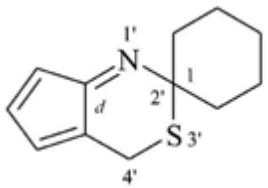
[4 heteroatomy = 4 heteroatomy; 3 oksygenowe atomy > 1 oksygenowy atom]

(3)



spiro[[3,l]benzoksazyno-4, 1′-cyklopentan] (PIN)

jest starszy od



4'*H*-spiro[cykloheksano-1,2'-cyklopenta[*d*][1,3]tiazyna] (PIN)

[2 heteroatomy = 2 heteroatomy]
[1 atom azotu, 1 atom tlenu > 1 atom azotu, 1 atom siarki]

P-44.2.2 Kryteria starszeństwa do ustalania starszeństwa pierścieni mające zastosowanie do układów pierścieni szczególnego typu.

P-44.2.2.1 Systemy monocykliczne (patrz P-22)

Jeśli P-44.2.1 nie prowadzi do jednoznaczności, dalsze kryteria stosujące się do systemów monocyklicznych znajdują się w P-44.4.

P-44.2.2.2 Układy policykliczne. Starszy układ policykliczny występuje wcześniej w poniższej liście typów policyklicznych układów pierścieni.

Porządek starszeństwa macierzystych wodorków mających tę samą liczbę identycznych heteroatomów, tę samą liczbę pierścieni i tę samą liczbę atomów szkieletowych stanowi zmianę w stosunku do poprzedniej praktyki. Ustalanie starszeństwa policyklicznych układów pierścieni jest obecnie ułatwione przez zastosowanie hierarchicznego porządku układów pierścieni, obejmującego cykliczne i acykliczne układy fanów i szereguje wszystkie układy pierścieni według porządku podanego w zaleceniu.

(a) układ pierścieni spiro (patrz P-24);

(b) układ cyklicznych fanów (cyklofanów) (patrz P-26);

(c) układ pierścieni skondensowanych (patrz P-25);

(d) układ pierścieni skondesowanych z mostkiem (patrz P-25);

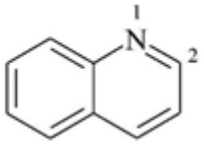
(e) układ nie-skondensowanego pierścienia z mostkiem (patrz P-23);

(f) układ liniowego fanu (patrz P-26);

(g) zespoły pierścieni (patrz P-28).

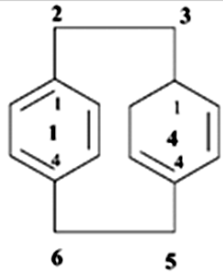
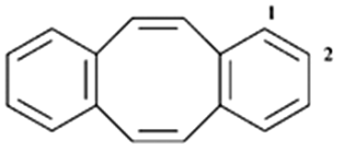
Wybory wewnątrz każdego typu zilustrowano w punktach od P-44.2.2.2.1 do P-44.2.2.2.7. Dalsze kryteria stosowane wobec policyklicznych układów pierścieni znajdują się w P-44.4.

Przykłady (symbol > oznacza ‘starszy od’):

(1) > 

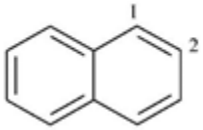
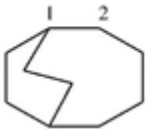
8-azaspiro[4.5]dekan (PIN) chinolina (PIN)

[układ pierścieni spiro (a) > skondensowany układ pierścieni (c)]

(2)  > 

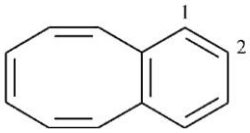
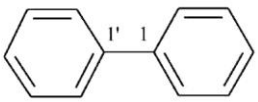
l,4(l,4)-dibenzenacykloheksafan (PIN) dibenzo[*a,e*][8]annulen (PIN)

[cykliczny układ pierścieni fanu (b) > układ pierścieni skondensowanych (c)]

(3)  > 

naftalen (PIN) bicyklo[4.2.2]dekan [PIN]

[układ pierścieni skondensowanych (c) > układ nie-skondensowany z mostkiem (e)]

(4)  > 

benzo[8]annulen (PIN) 1,1'-bifenyl (PIN)

[układ pierścieni skondensowanych (c) > zespół pierścieni (g)]

P-44.2.2.2.1 Kryteria starszeństwa dla układów pierścieni spiro podane poniżej stosuje się aż nie ma więcej alternatyw. Krytria te są zilustrowane w punktach od P-44.2.2.2.1.1 do P-44.2.2.2.1.3. Najstarszy system spiro:

(a) ma większą liczbę połączeń spiro;

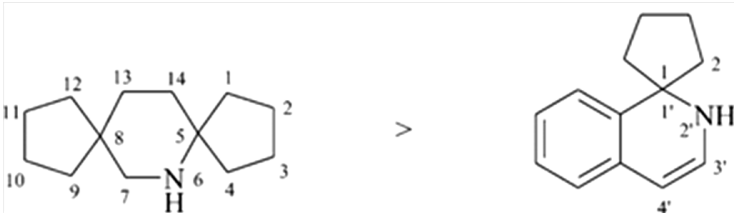
(b) składa się z nasyconych pierścieni monocyklicznych;

(c) składa się wyłącznie z odrębnych komponentów.

Dalsze kryteria stosowane do układów pierścieni spiro znajdują się w P-44.4.

P-44.2.2.2.1.1 Starszy system spiro ma większą liczbę połączeń spiro [kryterium (a) w P-44.2.2.2.1].

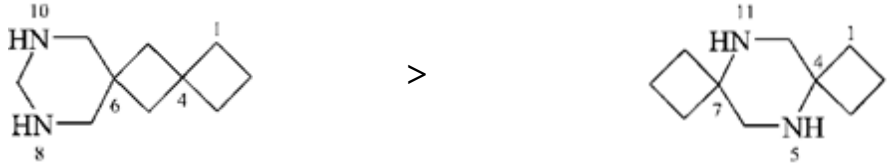
Przykład (symbol > oznacza ‘starszy od’)



6-azadispiro[4.2.4^{8}.2^{5}]tetradekan (PIN) 2'*H*-spiro[cyklopentano-l,1'-izochinolina] (PIN)

[2 połączenia spiro > 1 połączenie spiro]

P-44.2.2.2.1.2 Starszy układ spiro składa się tylko z nasyconych monocyklicznych pierścieni [kryterium (b) w P-44.2.2.2.1] i ma najniższy lokant(y) przy atomie (-ach) spiro.



8,10-diazadispiro[3.1.5^{6}.l^{4}]dodekan (PIN) 5,11-diazadispiro[3.2.3^{7}.2^{4}]dodekan (PIN)

[nasycone monocykliczne pierścienie, oba z 2 połączeniami spiro;
zestaw lokantów dla połączeń spiro: ‘4,6’ jest niższy od ‘4,7’]

P-44.2.2.2.1.3 Starszy system spiro składa się wyłącznie z odrębnych składników [kryterium (c) w P-44.2.2.2.1] i:

(a) starszy składnik jest określony kryteriami podanymi powyżej i poniżej, określającymi odpowiedni rodzaj pierścieni lub układów pierścieni kiedy składniki porównuje się w porządku starszeństwa.

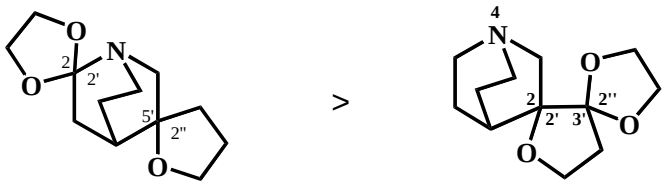
Przykład (symbol > oznacza ‘starszy od’) :

2'*H*-spiro[cyklopentano-l, 1′-izochinolina] (PIN) spiro[indeno-l,4′-piperydyna] (PIN)

[izochinolina > piperydyna]

(b) starszy składnik jest określony kryteriami podanymi powyżej i poniżej, określającymi odpowiedni rodzaj pierścieni lub układów pierścieni kiedy porównuje się porządek wymieniania składnika w nazwie.

Przykład (symbol > oznacza ‘starszy od’):



I **II**

I dispiro[[1]azabicyklo[2.2.2]oktan-3,2′-oksolano-4′,2′′-[1,3]dioksolan] (PIN)

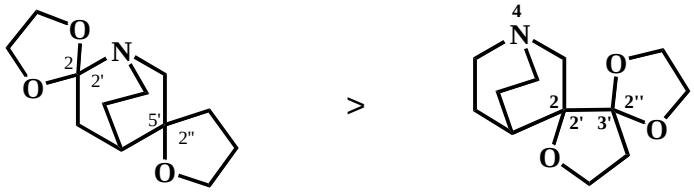
jest starszy od

II dispiro[[l,3]dioksolano-2,2′-[l]azabicyklo[2.2.2]oktan-5′,2′′-oksolan] (PIN)

[najpierw wymieniono składnik azabicyklo[2.2.2]oktan > dioksolan)]

(c) ma niższe lokanty atomów spiro w porządku wymieniania w nazwie.

Przykład (symbol > oznacza ‘starszy od’):



I **II**

(I) 1′-azadispiro[[1,3]dioksolano-2,2′-bicyklo[2.2.2]oktano-5′,2′′-oksolan] (PIN)

jest starszy od

(II) 4-azadispiro[bicyklo[2.2.2]oktano-2,2′-oksolano-3′,2′′-[1,3]dioksolan] (PIN)

[pierwszy wymieniany składnik dioksolan > bicyclo[2.2.2]oktanu]

P-44.2.2.2.2 Kryteria starszeństwa dla cyklicznych układów fanów podane niżej stosuje się sukcesywnie aż nie ma już alternatyw. Kryteria te zilustrowano w puktach od P-44.2.2.2.2.1 do P-44.2.2.2.2.8.

Starszy cykliczny układ fanu:

(a) jest tym, który występuje wcześniej w następujące liście podstawowych układów szkieletów pierścieni fanów: spiro, von Baeyera, monocyklicznych;

(b) ma starszy amplifikant, zgodnie z definicją zawartą w punktach od P-44.2.1.2 do P-44.2.1.8;

(c) ma najniższy lokant(y) przy superatomie we wszystkich amplifikantach; najpierw jako zespół porównywany człon po członie w kolejności wzrastającej wartości, a następnie w kolejności wymieniania w nazwie;

(d) ma niższy lokant(y) dla starszych amplifikantów;

(e) ma niższy zestaw lokantów przyłączenia rozważanych jako zestaw przy porównywaniu, znak po znaku, w kolejności wzrastających wartości liczbowych;

(f) ma niższy zestaw lokantów przyłączenia przy porównywaniu, znak po znaku, w kolejności wymieniania w nazwie;

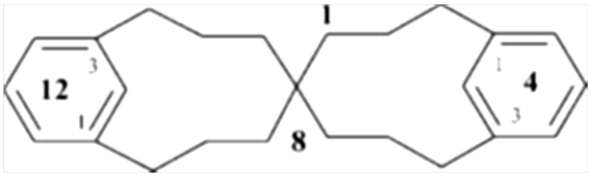
(g) ma niższy lokant(y) dla heteroatomów wprowadzonych przez zamianę (‘a’) szkieletu, bez uwzględnienia ich rodzaju;

(h) ma niższy lokant(y) dla heteroatomów wprowadzonych przez nomenklaturę zamiany (‘a’) szkieletu wymienianych wcześniej w następującej kolejności:
F > Cl > Br > I > O > S > Se > Te > N > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al > Ga > In > Tl.

Dalsze kryteria stosowane do układów cyklicznych fanów znajdują się w P-44.4.

P-44.2.2.2.2.1 Starszy układ cykliczny fanu występuje wcześniej w następującej liście podstawowych szkieletów fanów: spiro > nieskondensowany mostkowy (von Baeyer) > monocykliczny.

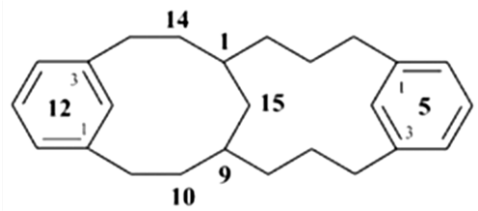
Przykłady (w kolenności malejącego starszeństwa zgodnie z kryteriami P-44.2.2.2.2):



4,12(l,3)-dibenzenaspiro[7.7]pentadekafan (PIN)

(układ szkieletowy spiro fanu)

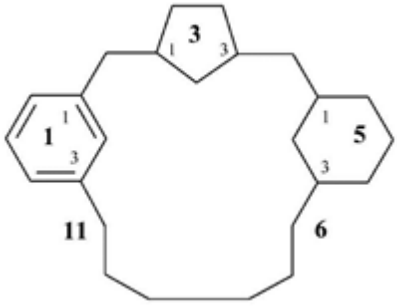
jest starszy od



5,12(l,3)-dibenzenabicyklo[7.5.1]pentadekafan (PIN)

(układ szkieletowy von Baeyera fanu)

starszy od

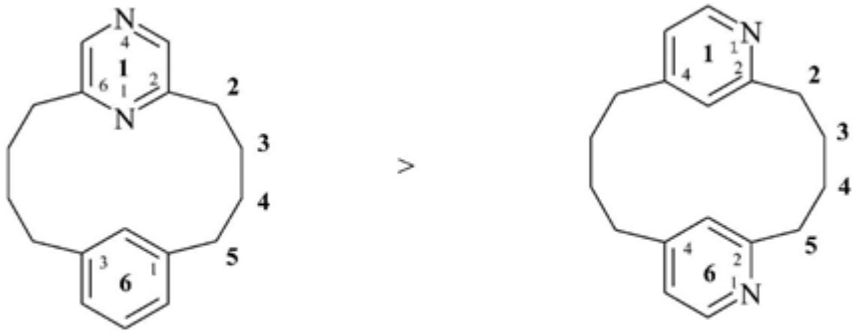


l(l,3)-benzena-5(l,3)-cycloheksana-3(l,3)-cyklopentanacykloundekafan (PIN)

(monocykliczny układ szkieletowy fanu)

P-44.2.2.2.2.2 Starszy układ cykliczny fanu ma najstarszy amplifikant zgodnie z definicją zawartą w punktach od P-44.2.1.2 do P-44.2.1.8 [kryterium (c) w P-44.2.2.2.2].

Przykład (symbol > oznacza ‘starszy od’):



(I) 1(2,6)-pirazyna-6(l,3)-benzenacyklodekafan (PIN)

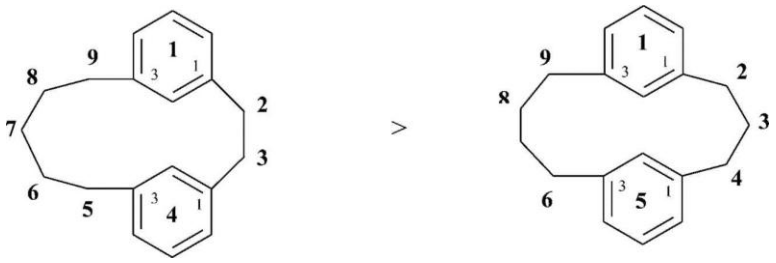
jest starszy od

(II) l,6(2,4)-dipirydynacyklodekafan (PIN)

[pirazyna > pirydyna]

P-44.2.2.2.2.3 Starszy układ cyklicznego fanu ma niższe lokanty superatomów wszystkich amplifikantów, najpierw jako zespół porównywany znak po znaku w kolejności wzrastającej wartości numerycznej, a następnie w kolejności wymieniania w nazwie [kryterium (c) w P-44.2.2.2.2].

Przykład (symbol > oznacza ‘starszy od’):



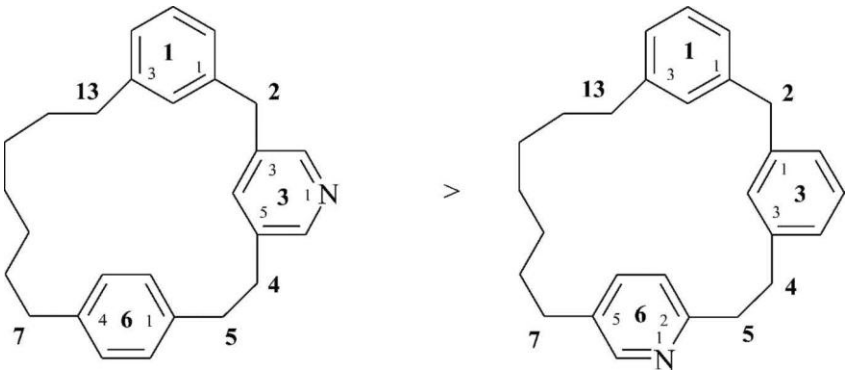
(I) 1,4(1,3)-dibenzenacyklononafan (PIN)

(II) 1,5(1,3)-dibenzenacyklononafan (PIN)

[zestaw lokantów superatomów ‘1,4’ w **(I)** ma niższą wartość niż ‘1,5’ w **(II)**]

P-44.2.2.2.2.4 Starszy układ cyklofanowy ma najniższe lokanty w starszym amplifikancie [kryterium (d) w P-44.2.2.2.2].

Przykład (symbol > oznacza ‘starszy od’):



I **II**

I 3(3,5)-pirydyna-l(l,3),6(l,4)-dibenzenacyklotridekafan (PIN)

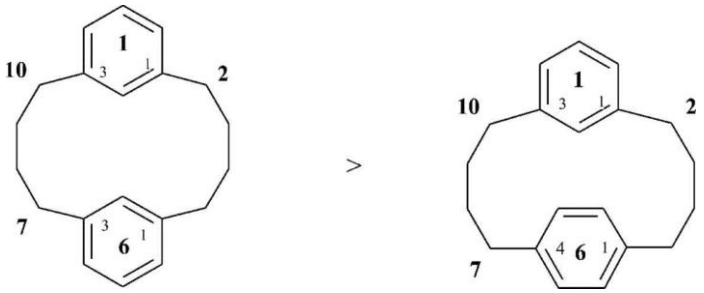
jest starszy od

II 6(2,5)-pirydyna-l,3(l,3)-dibenzenacyklotridekafan (PIN)

[lokant ‘3’ superatomu dla starszego amplifikanta pirydyny jest niższy od ‘6’]

P-44.2.2.2.2.5 Starszy układ cyklofanowy ma najniższy zestaw lokantów przyłączenia rozważanych jako zestaw przy porównywaniu, znak po znaku, w kolejności wzrastającej wartości numerycznej [kryterium (e) w P-44.2.2.2.2].

Przykład (symbol > oznacza ‘starszy od’):

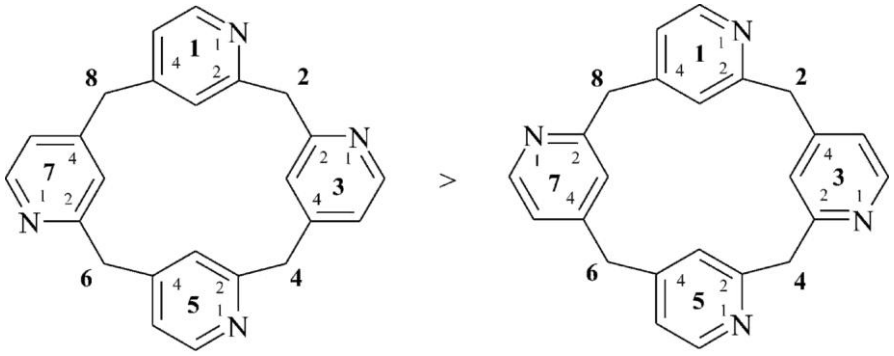


l,6(l,3)-dibenzenacyklodekafan (PIN) l(l,3),6(l,4)-dibenzenacyflodekafan (PIN)

[zestaw lokantów przyłączenia ‘(1,3)(1,3)’ jest niższy niż ‘(1,3)(1,4)’]

P-44.2.2.2.2.6 Starszy układ cyklofanowy ma najniższy zestaw lokantów przyłączenia rozważanych jako zestaw przy porównywaniu, znak po znaku, w kolejności wymieniania w nazwie [kryterium (f) w P-44.2.2.2.2].

Przykład (symbol > oznacza ‘starszy od’):



I **II**

I l,3,5,7(2,4)-tetrapirydynacyklooktafan (PIN)

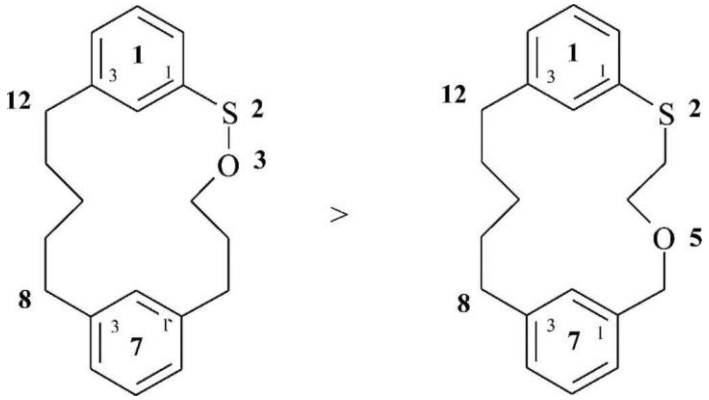
jest starszy od

II l,5(2,4),3,7(4,2)-tetrapirydynacyklooktafan (PIN)

[zestaw lokantów związanych ‘(2,4)(2,4)(2,4)(2,4)’ jest niższy niż ‘(2,4)(2,4)(4,2)(4,2)’]

P-44.2.2.2.2.7 Starszy układ cyklofanowy ma najniższy lokant(y) dla heteroatomów wprowadzonych przez nomenklaturę zamiany (‘a’) szkieletu, bez uwzględnienia ich rodzaju [kryterium (g) w P-44.2.2.2.2].

Przykład (symbol > oznacza ‘starszy od’):



I **II**

I 3-oksa-2-tia-l,7(l,3)-dibenzenacyklododekafan (PIN)

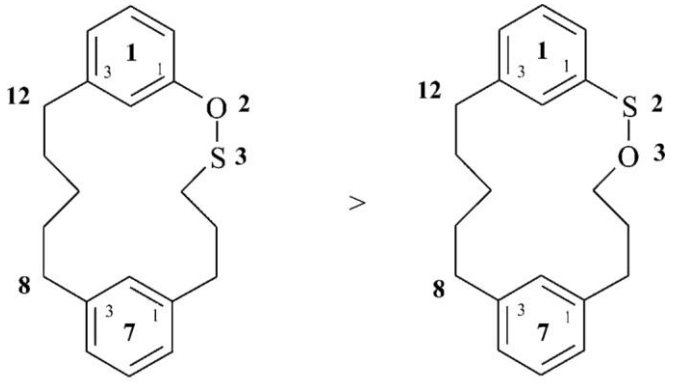
jest starszy od

II 5-oksaa-2-tia-l,7(l,3)-dibenzenacyklododekafan (PIN)

[zestaw lokantów heteroatomów ‘2,3’ jest niższy niż ‘2,5’]

P-44.2.2.2.2.8 Starszy układ cyklofanowy ma najniższy lokant(y) dla heteroatomów wprowadzonych przez nomenklaturę zamiany (‘a’) wymienianych wcześniej w następującej kolejności:
F > Cl > Br > I > O > S > Se > Te > N > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al > Ga > In > Tl.

Przykład (symbol > oznacza ‘starszy od’):



I **II**

I 2-oksa-3-tia-l,7(l,3)-dibenzenacyklododekafan (PIN)

jest starszy od

II 3-oksa-2-tia-l,7(l,3)-dibenzenacyklododekafan (PIN)

[lokant ‘2’ starszego heteroatomu ‘O’ jest niższy niż ‘3’]

P-44.2.2.2.3 Kryteria starszeństwa dla układów pierścieni skondensowanych stosuje się aż do osiągnięcia sytuacji, w której zabraknie alternatywy. Kryteria te przedstawiono w punktach od P-44.2.2.2.3.1 do P-44.2.2.2.3.5. Starszy system pierścieni skondensowanych:

(a) ma największy indywidualny składnik pierścieniowy występujący w pierwszym punkcie rozróżnienia, gdy wielkości ich pierścieni są porównywane w malejącym porządku;

(b) większą liczbę pierścieni w poziomym rzędzie;

(c) ma niższą literę(y) w opisie skondensowania, porównywane jako zestaw; litery pomijane w nazwach są uwzględniane przy stosowaniu tego kryterium;

(d) ma niższą liczbę(y) w opisie skondensowania, w kolejności pojawiania się w nazwie; lokanty pomijane w nazwach są uwzględniane przy stosowaniu tego kryterium;

(e) ma starszy składnik systemu pierścieniowego zgodnie z P-25.8, gdy jego składniki są porównywane w kolejności malejącego starszeństwa.

Dalsze kryteria stosujące się do układów pierścieni skondensowanych znajdują się w P-44.4.

P-44.2.2.2.3.1 Starszy układ pierścieni skondensowanych ma największy indywidualny składnik pierścieniowy występujący w pierwszym punkcie rozróżnienia, gdy wielkości ich pierścieni są porównywane, w malejącym porządku [kryterium (a) P-44.2.2.2.3].

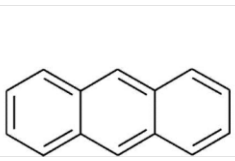
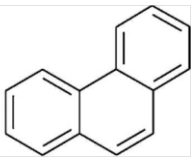
Przykład (symbol > oznacza ‘starszy od’):

azulen (PIN) naftalen (PIN)

[wielkość pierścienia ‘7’ w zestawie pierścieni ‘7,5’ jest większa niż ‘6’ w zestawie pierścieni ‘6,6’

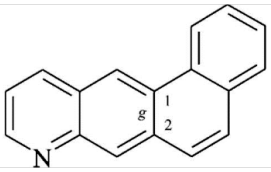
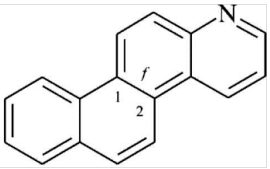
P-44.2.2.2.3.2 Starszy układ pierścieni skondensowanych ma większą liczbę pierścieni w poziomym rzędzie [kryterium (b) P-44.2.2.2.3].

Przykłady (symbol > oznacza ‘starszy od’):

(1)  > 

antracen (PIN) fenantren (PIN

[trzy pierścienie w poziomym rzędzie jest więcej niż dwa]

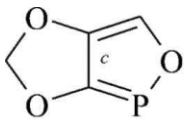
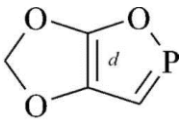
(2)  > 

nafto[1,2-*g*]chinolina (PIN) nafto[2,1-*f*]chinolina (PIN)

[trzy pierścienie w poziomym rzędzie jest więcej niż dwa]

P-44.2.2.2.3.3 Starszy układ pierścieni skondensowanych ma niższą alfabetycznie literę(y) w opisie sprzężenia, porównywane jako zestaw; litery pomijane w nazwach są uwzględniane przy stosowaniu tego kryterium [kryterium (c) P-44.2.2.2.3].

Przykład (symbol > oznacza ‘starszy od’):

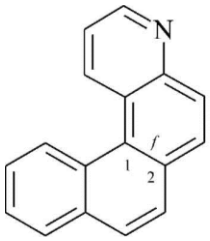
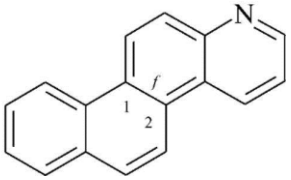
 > 

5*H*-[l,3]dioksolo[4,5-*c*]oksafosfol (PIN) 5*H*-[l,3]dioksolo[4,5-*d*]oksafosfol (PIN)

[litera ‘c’ w opisie sprzężenia jest alfabetycznie niższa niż ‘d’]

P-44.2.2.2.3.4 Starszy układ pierścieni skondensowanych ma niższy zestaw liczb w opisie sprzężenia, w kolejności pojawiania się w nazwie; lokanty pomijane w nazwach są uwzględniane przy stosowaniu tego kryterium; [kryterium (d) P-44.2.2.2.3].

Przykład (symbol > oznacza ‘starszy od’):

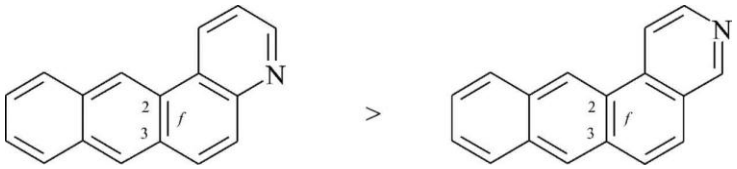
 > 

nafto[l,2-*f*]chinolina (PIN) nafto[2,l-*f*]chinolina (PIN)

[zestaw lokantów ‘1,2’ w opisie sprzężenia jest niższy od ‘2,1’]

P-44.2.2.2.3.5 Starszy układ pierścieni skondensowanych ma starszy składnik układu pierścieniowego zgodnie z P-25.8, gdy jego składniki są porównywane w kolejności malejącego starszeństwa.

Przykład (symbol > oznacza ‘starszy od’):



nafto[2,3-*f*]chinolina (PIN) nafto[2,3-*f*]izochinolina (PIN)

[starszy układ pierścieni chinolina jest starsza od izochinoliny (patrz P-25.2.1, Tablica 2.8)]

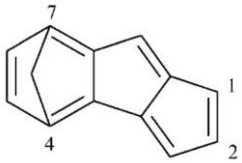
P-44.2.2.2.4 Podane poniżej kryteria starszeństwa układów mostkowych pierścieni skondensowanych są stosowane kolejno aż do uzyskania jednoznaczności. Kryteria są ilustrowane w podrozdziałach od P-42.2.2.2.4.1 do P-42.2.2.2.4.14. Starszy układ mostkowych pierścieni skondensowanych:

(a) ma mostkowy układ pierścieni z większą liczbą pierścieni przed utworzeniem mostka;
(b) jest mostkowym układem pierścieni z większą liczbą atomów w pierścieniach przed utworzeniem mostka;
(c) jest mostkowym układem pierścieni z mniejszą liczba heteroatomów w układzie pierścieni skondensowanych;
(d) jest mostkowym układem pierścieni ze starszym układem skondensowanych pierścieni przed utworzeniem mostka według P-44.2.2.2.3;
(e) ma niższy zestaw lokantów przyłączeń mostka;
(f) ma niższy lokant(y) heteroatomów w mostkach, niezależnie od ich rodzaju;
(g) ma niższy lokant(y) heteroatomów w mostkach, w porządku, F > Cl > Br > I > O > S > Se > Te > N > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al. > Ga > In > Tl;
(h) ma mniejsza liczbę złożonych mostków;
(i) ma mniejszą liczbę zależnych mostków;
(j) ma mniejszą liczbę atomów w zależnych mostkach;
(k) ma większą liczbę diwalencyjnych mostków;
(l) ma niższy zestaw lokantów przyłączenia niezależnych mostków;
(m) ma niższy zestaw lokantów przyłączenia zależnych mostków;
(n) ma układ skondensowanych pierścieni z większą liczbą nie skumulowanych podwójnych wiązań przed utworzeniem mostka.

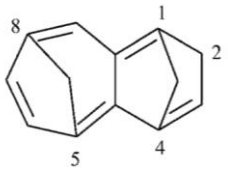
Dalsze kryteria mające zastosowanie do układów mostkowych skondensowanych pierścieni znajdują się w P-44.4.

P-44.2.2.2.4.1 Starszy układ mostkowych skondensowanych pierścieni ma mostkowy układ pierścieni z większą liczbą pierścieni przed utworzeniem mostka [kryterium (a) w P-44.2.2.2.4].

Przykład (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):



>

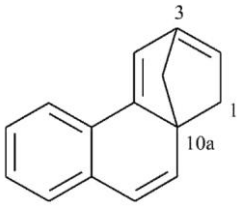


4,7-metanocyklopenta[*a*]inden (PIN) 2*H*-1,4:5,8-dimetanobenzo[7]annule (PIN)

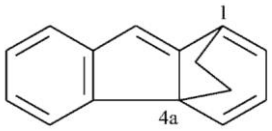
[trzy pierścienie w układzie pierścieni przed utworzeniem mostka to więcej niż dwa]

P-44.2.2.2.4.2 Starszy układ mostkowych skondensowanych pierścieni jest mostkowym układem pierścieni z większą liczbą atomów w pierścieniach przed utworzeniem mostka [kryterium (b) w P-44.2.2.2.4].

Przykład (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):



>

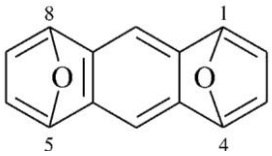


1*H*-3,10a-metanofenantren (PIN) 1,4a-etanofluoren (PIN)

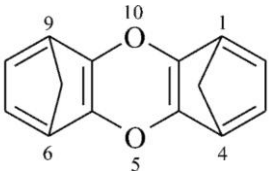
[czternaście atomów w układzie pierścieni przed utworzeniem mostka to więcej niż trzynaście]

P-44.2.2.2.4.3 Starszy układ mostkowych pierścieni skondensowanych jest mostkowym układem pierścieni z mniejszą liczba heteroatomów w układzie pierścieni skondensowanych przed utworzeniem mostka [kryterium (c) w P-44.2.2.2.4].

Przykład (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):



>

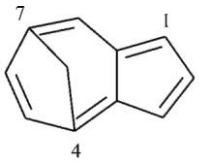


1,4:5,8-diepoksyantracen (PIN) 1,4:6,9-dimetanooksantren (PIN)

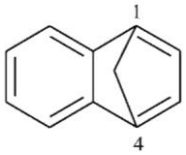
[zero heteroatomów w układzie skondensowanych pierścieni przed utworzeniem mostków to jest mniej niż dwa]

P-44.2.2.2.4.4 Starszy układ mostkowych pierścieni skondensowanych jest mostkowym ukladem pierścieni ze starszym układem skondensowanych pierścieni przed utworzeniem mostka według P-44.2.2.2.3 [kryterium (d) w P-44.2.2.2.4].

Przykład (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):



>

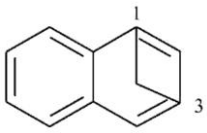


4,7-metanoazulen (PIN) 1,4-metanonaftalen (PIN)

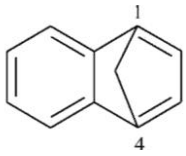
[azulen jest starszy od naftalenu, patrz P-44.2.1]

P-44.2.2.2.4.5 Starszy mostkowy układ pierścieni ma niższy zestaw lokantów przyłączeń mostka [kryterium (e) w P-44.2.2.2.4].

Przykład (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):



>

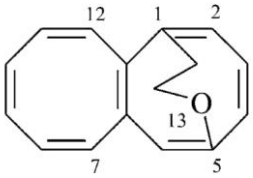


1,3-metanonaftalen (PIN) 1,4-metanonaftalen

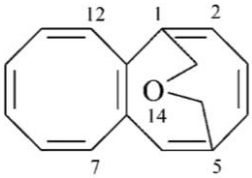
[zestaw lokantów przyłączeń mostka ‘1,3’ jest niższy od ‘1,4’]

P-44.2.2.2.4.6 Starszy układ mostkowych pierścieni skondensowanych ma niższy lokant(y) heteroatomów w mostkach niezależnie od ich rodzaju [kryterium (f) w P-44.2.2.2.4].

Przykład (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):



>

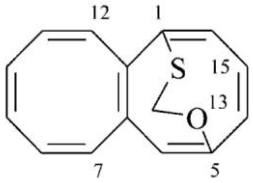


5,1-(epoksyetano)oktalen (PIN) 1,5-(metanooksymetano)oktalen (PIN)

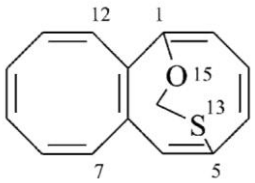
[lokant ‘13’ mostkowego atomu tlenu jest niższy od ‘14’]

P-44.2.2.2.4.7 Starszy układ mostkowych pierścieni skondensowanych ma niższy lokant(y) heteroatomów w mostkach, w porządku, F > Cl > Br > I > O > S > Se > Te > N > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al > Ga > In > Tl [kryterium (g) w P-44.2.2.2.4].

Przykład (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):



>

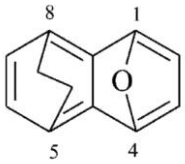


5,1-(epoksymetanosulfano)oktalen (PIN) 1,5-(epoksymetanosulfano)oktalen (PIN)

[lokant ‘13’ starszego atomu tlenu w mostku jest niższy od ‘15’]

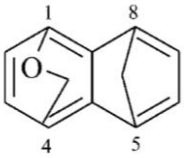
P-44.2.2.2.4.8 Starszy układ mostkowych pierścieni skondensowanych ma mniejsza liczbę złożonych mostków [kryterium (h) w P-44.2.2.2.4].

Przykład (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):



(I)

>



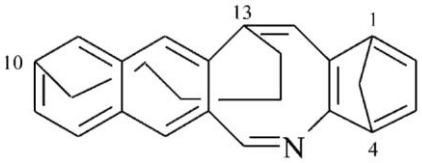
(II)

(I) 1,4-epoksy-5,8-etanonaftalen (PIN) jest starszy od **(II)** 1,4-(epoksymetano)-5,8-metanonaftalen (PIN)

[zero złożonych mostków to jest mniej niż jeden]

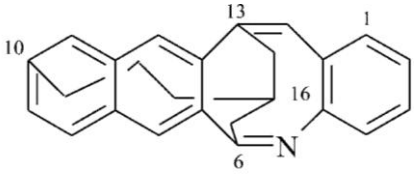
P-44.2.2.2.4.9 Starszy układ mostkowych pierścieni skondensowanych ma mniejszą liczbę zależnych mostków [kryterium (i) w P-44.2.2.2.4].

Przykład (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):



I

>



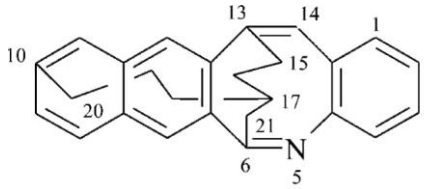
II

I 1,4-metano-10,13-pentanonafto[2,3-*c*] [1]benzoazocyn (PIN)
jest starszy od
II 6,16-metano-10,13-pentanonafto[2,3-*c*] [1]benzoazocyn (PIN)

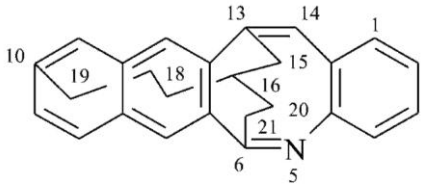
[zero zależnych mostków to jest mniej niż jeden]

P-44.2.2.2.4.10 Starszy układ mostkowych pierścieni skondensowanych ma mniejszą liczbę atomów w zależnych mostkach [kryterium (j) w P-44.2.2.2.4].

Przykład (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):



>



I **II**

I 6,17-metano-10,13-heksanonafto[2,3-*c*] [1]benzazocyn (PIN)

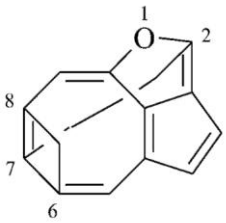
jest starszy od

II 6,16-etano-10,13-pentanonafto[2,3-*c*] [1]benzazocyn (PIN)

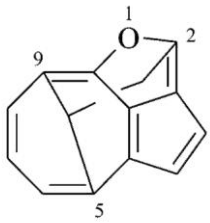
[jeden atom w zależnym mostku w **I** (atom 21) to mniej niż dwa atomy w **II** (atomy 20 i 21)]

P-44.2.2.2.4.11 Starszy układ mostkowych pierścieni skondensowanych ma większą liczbę diwalencyjnych mostków [kryterium (k) w P-44.2.2.2.4].

Przykład (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):



>



I **II**

I 1-oksa-2,7:6,8-dimetanocyklookta[1,2,3-*cd*] pentalen (PIN)

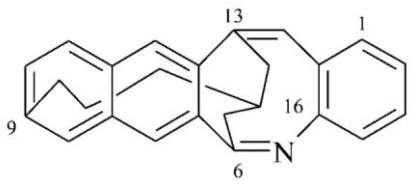
jest starszy od

II 1-oksa-5,9,2-(etano[1,1,2]triylo)cyklookta [1,2,3-*cd*] pentalen (PIN)

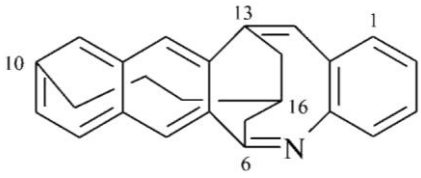
[‘2’ diwalencyjne mostki w **I** są starsze od ‘1’ triwalencyjnego mostka w **II**]

P-44.2.2.2.4.12 Starszy układ mostkowych pierścieni skondensowanych ma niższy zestaw lokantów przyłączenia niezależnych mostków [kryterium (l) w P-44.2.2.2.4].

Przykład (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):



>



I **II**

I 6,16-metano-9,13-pentanonafto[2,3-*c*] [1]benzoazocyn (PIN)

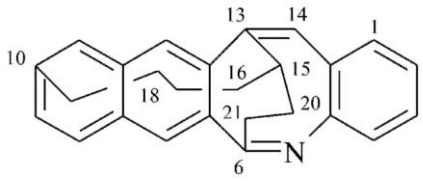
jest starszy od

II 6,16-metano-10,13-pentanonafto[2,3-*c*] [1]benzoazocyn (PIN)

[zestaw lokantów ‘9,13’ niezależnego mostka w **I** jest niższy od zestawu lokantów ’10,13’ w **II**]

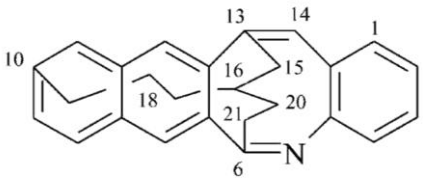
P-44.2.2.2.4.13 Starszy układ mostkowych pierścieni skondensowanych ma niższy zestaw lokantów przyłączenia zależnych mostków [kryterium (m) w P-44.2.2.2.4].

Przykład (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):



I

>



II

I 6,15-etano-10,13-pentanonafto[2,3-*c*] [1]benzoazocyn (PIN)

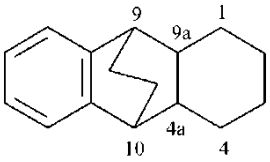
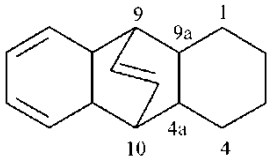
jest starszy od

II 6,16-etano-10,13-pentanonafto[2,3-*c*] [1]benzazocyn (PIN)

[zestaw lokantów ‘6,15’ zależnego mostka w **I** jest niższy od zestawu lokantów ‘6,16’ w **II**]

P-44.2.2.2.4.14 Starszy układ mostkowych pierścieni skondensowanych ma układ skondensowanych pierścieni z większą liczbą nie skumulowanych podwójnych wiązań przed utworzeniem mostka [kryterium (n) w P-44.2.2.2.4].

Przykład (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):

 **(I)**	>	 **(II)**

(**I**) 1,2,3,4,4a,9,9a,10-oktahydro-9,10-etanoantracen (PIN)

jest starszy od

(**II**) 1,2,3,4,4a,8a,9,9a,10,10a-dekahydro-9,10-etanoantracen (PIN)

[trzy nieskumulowane podwójne wiązania w **I** to więcej niż dwa nieskmulowane podwójne wiązania w **II**]

P-44.2.2.2.5 Kryteria starszeństwa dla mostkowych nieskondensowanych ukladów pierścieni (układy pierścieni von Baeyera) stosuje się kolejno az do osiągnięcia jednoznaczności. Przykłady stosowania tych kryteriów podane są w podrozdziałach od P-44.2.2.2.5.1 do P-44.2.2.2.5.3. Starszy układ mostkowych nieskondensowanych pierścieni:

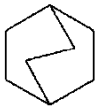
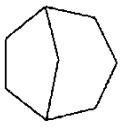
(a) ma niższą liczbę w pierwszym miejscu różnicy w zestawie deskryptorów opisujących wielkości pierścieni rozpatrywanych w kolejności wymieniania w nazwie;
(b) ma niższy zestaw lokantów przyłączenia mostka (lokanty w indeksie górnym) w pierwszym miejscu różnicy przy porównaniu znak po znaku w kolejności rosnącej wartości numerycznej;

(c) ma niższy zestaw lokantów przyłączenia mostka (lokanty w indeksie górnym) w pierwszym miejscu różnicy przy porównaniu znak po znaku w kolejności wymieniania w nazwie.

Dalsze kryteria stosowane w przypadku układów mostkowych pierścieni nieskondensowanych opisano w P-44.4.

P-44.2.2.2.5.1 Starszy układ mostkowych nieskondensowanych pierścieni ma niższą liczbę w pierwszym miejscu różnicy w zestawie deskryptorów opisujących wielkości pierścieni rozpatrywanych w klejności wymieniania w nazwie [kryterium (a) w P-44.2.2.2.5].

Przykład (symbol > oznacza ‘jest starszy od’]

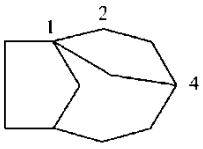

>


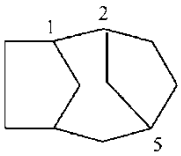
bicyklo[2.2.2]oktan (PIN) bicyklo[3.2.1]oktan (PIN)

[zestaw deskryptora pierścienia ‘2.2.2’ jest niższy od zestawu ‘3.2.1’]

P-44.2.2.2.5.2 Starszy układ mostkowych nieskondensowanych pierścieni ma niższy zestaw lokantów przyłączenia mostka (lokanty w indeksie górnym) w pierwszym miejscu różnicy przy porównaniu znak po znaku w kolejności rosnącej numerycznej wartości [kryterium (b) w P-44.2.2.2.5].

Przykład (symbol > oznacza ‘jest starszy od’]



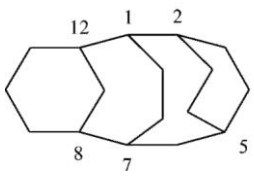
>


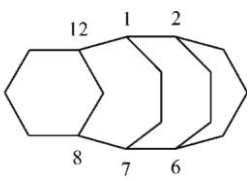
tricyklo[5.2.1.1^{1,4}]undekan (PIN) tricyklo[5.2.1.1^{2,5}]undekan (PIN)

[zestaw lokantów przyłączenia mostka’1,4’ jest niższy od zestawu ‘1,5’]

P-44.2.2.2.5.3 Starszy układ mostkowych nieskondensowanych pierścieni ma niższy zestaw lokantów przyłączenia mostka (lokanty w indeksie górnym) w pierwszym miejscu różnicy przy porównaniu znak po znaku w kolejnośći wymieniania w nazwie [kryterium (c) w P-44.2.2.2.5].

Przykład (symbol > oznacza ‘jest starszy od’]



>


tetracyklo[5.5.2.2^{2,5}.1^{8,12}]heptadekan (PIN) tetracyklo[5.5.2.2^{2,6}1^{8,12}]heptadekan (PIN)

[zestaw lokantów przyłączenia mostka ‘2,5,8,12’ jest niższy od zestawu ‘2,6,8,12’]

P-44.2.2.2.6 Liniowe (acykliczne) fany

Chociaż układy liniowych fanów mogą być rozpatrywane jako heteroacykliczne łańcuchy, w których amplifikanty są heteroatomami, a łączące atomy lub łańcuchy są atomami węgla, starszeństwo liniowych (acyklicznych) fanów wynika ściśle z kryteriów używanych w przypadku układów cyklicznych fanów (patrz P-44.2.2.2.2). Zgodnie z tym kryteria starszeństwa układów liniowych fanów podane poniżej stosuje się kolejno aż do osiągnięcia jednoznaczności. Przykłady ilustrujące te kryteria pokazano w podrozdziałach od P-44.2.2.2.6.1 do P-44.2.2.2.6.10. Starszy układ liniowego fanu ma:

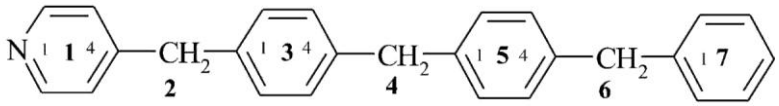
(a) starszy amplifikant, jak zdefiniowano w podrozdziałach od P-44.2.1.2 do P-44.2.1.8;
(b) najwięcej amplifikantów w ich porządku starszeństwa jak zdefiniowano w podrozdziałach od P-44.2.1.2 do P-44.2.8;
(c) maksymalną liczbę węzłów szkieletowych;
(d) niższy lokant(y) superatomu dla starszego amplifikanta;
(e) niższy lokant(y) superatomu dla wszystkich amplifikantów jako zespołu przy porównaniu każdy z każdym w kolejności rosnącej wartości, a następnie w kolejności wymieniania w nazwie;
(f) niższy lokant(y) superatomu dla wszystkich amplifikantów jako zespołu przy porównaniu w kolejności wymieniania w nazwie;
(g) niższy zestaw lokantów przyłączenia rozważanych jako zespół przy porównaniu znak po znaku w kolejności rosnącej wartości liczbowej;
(h) niższy zestaw lokantów przyłączenia przy porównaniu znak po znakuw kolejności ich wymieniania w nazwie
(i) większą liczbę heteroatomów wprowadzonych nomenklaturą zamienną (a) szkieletu bez względu na ich rodzaj;
(j) większą liczbę heteroatomów wprowadzonych nomenklaturą zamienną (a) szkieletu wymienianych jako pierwsze w następującym porządku: F > Cl > Br > I > O > S > Se > Te > N > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al. > Ga > In > Tl.

Dalsze kryteria stosowane do liniowych (acyklicznych) fanów znajdują się w P.44.4.

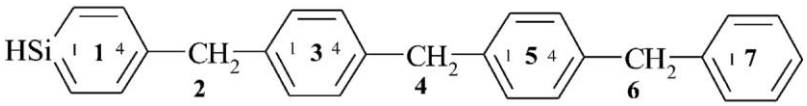
P-44.2.2.2.6.1 Starszy układ liniowego fanu ma starszy amplifikant, jak zdefiniowano w podrozdziałach od P-44.2.1.2 do P-44.2.1.8 [kryterium (a) w P-44.2.2.2.6].

Przykłady:

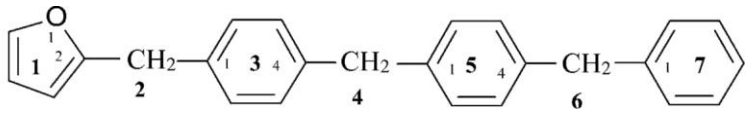
(1)



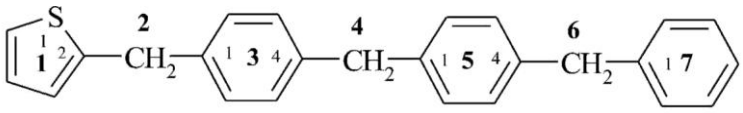
1(4)-pirydyna-7(1),3,5(1,4)-tribenzenaheptafan (PIN)
jest starszy od



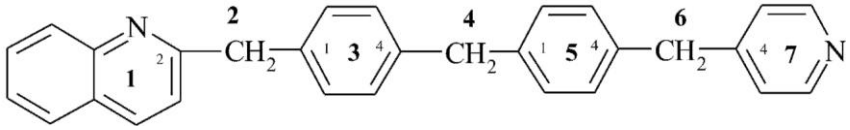
1(4)-silina-7(1),3,5(1,4)-tribenzenaheptafan (PIN)
[amplifikant ‘pirydyna’ jest starszy od amplifikanta ‘silina’]

(2) 

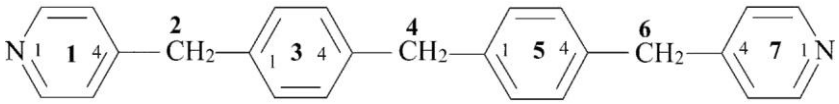
1(2)-furana-3,5(1,4),7(1)-tribenzenaheptafan (PIN)
jest starszy od



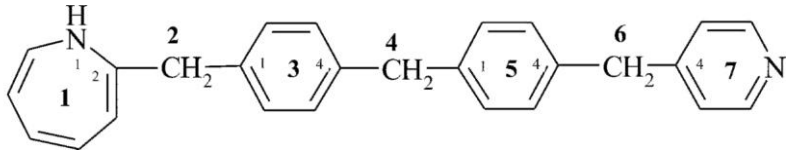
1(2)-tiofena-3,5(1,4),7(1)-tribenzenaheptafan (PIN)
[amplifikant ‘furana’ jest starszy od amplifikanta ‘tiofena’]

(3) 

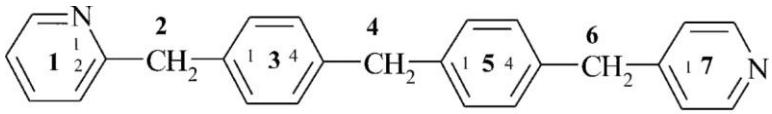
(2)-chinolina-7(4)-pirydyna-3,5(1,4)-dibenzenaheptafan (PIN
jest starszy od



1,7(4)-dipirydyna-3,5(1,4)-dibenzenaheptafan (PIN)
[amplifikant ‘chinolina’ jest starszy od amplifikanta ‘pirydyna’]

(4) 

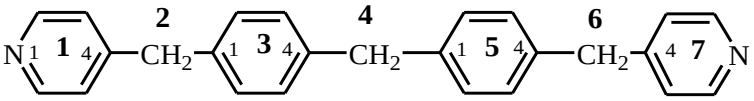
1[1]*H*-1(2)-azepina-7(4)-pirydyna-3,5(1,4)-dibenzenaheptafan (PIN)
jest starszy od



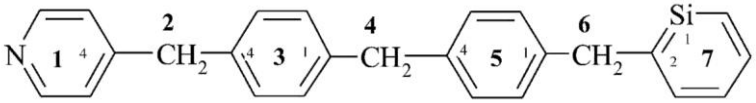
1(2),7(4)-dipirydyna-3,5(1,4)-dibenzenaheptafan (PIN)
[amplifikant ‘azepina’ jest starszy od amplifikanta ‘pirydyna’]

P-44.2.2.2.6.2 Starszy układ liniowego fanu ma najwięcej amplifikantów w ich porządku starszeństwa jak zdefiniowano w podrozdziałach od P-44.2.1.2 do P-44.2.8 [kryterium (b) w P-44.2.2.2.6].

Przykłady:

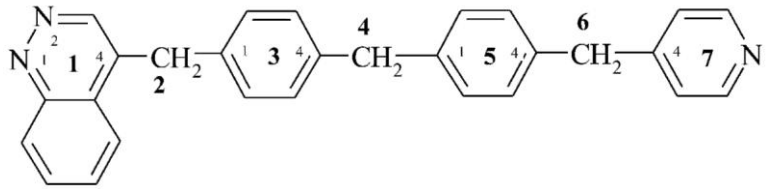


1,7(4)-dipirydyna-3,5(1,4)-dibenzenaheptafan (PIN)
jest starszy od

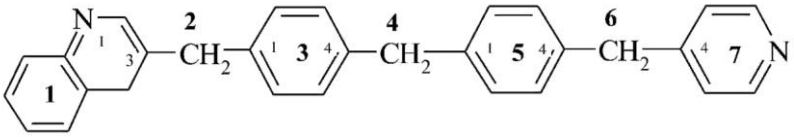


1(4)-pirydyna-7(2)-silina 3,5(1,4)-dibenzenaheptafan (PIN)
[ampifikanty ‘pirydyna/pirydyna/’ są starsze od amplifikantów ‘pirydyna/silina’]

(2)

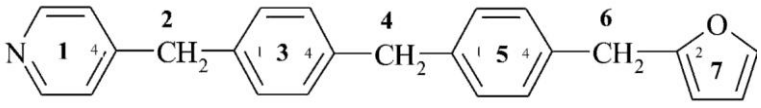


1(4)-cynnolina-7(4)-pirydyna-3,5(1,4)-dibenzenaheptafan (PIN)
jest starszy od

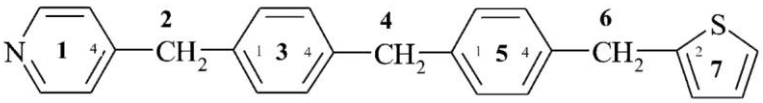


1(3)-chinolina-7(4)-pirydyna-3,5(1,4)-dibenzenaheptafan (PIN)
[amplifikanty ‘cynolina/pirydyna’ są starsze od amplifikantów ‘chinolina/pirydyna’]

(3)



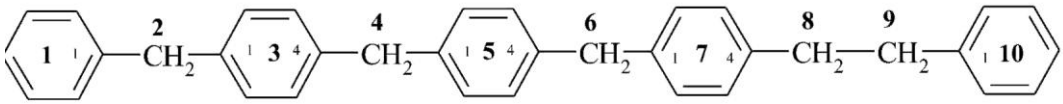
1(4)-pirydyna-7(2)-furana-3,5(1,4)-dibenzenaheptafan
jest starszy od



1(4)-pirydyna-7(2)-tiofena-3,5(1,4)-dibenzenaheptafan (PIN)
[amplifikanty ‘pirydyna/furana’ są starsze od amplifikantów ‘pirydyna/tiofena’]

P-44.2.2.2.6.3 Starszy układ liniowego fanu ma maksymalną liczbę węzłów szkieletowych [kryterium (c) w P-44.2.2.2.6].

Przykład:



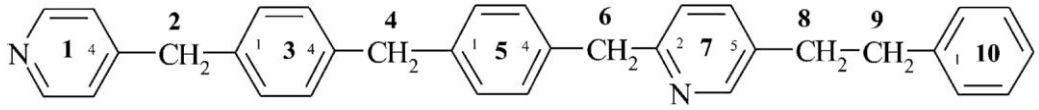
1,10(1),3,5,7(1,4)-pentabenzenadekafan (PIN)

jest starszy od

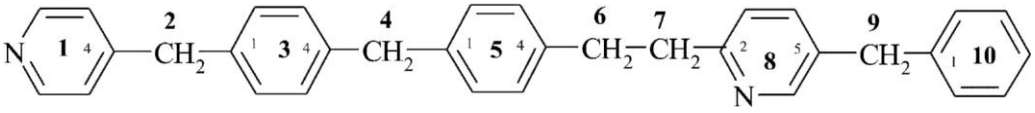
1,9(1),3,5,7(1,4)-pentabenzenanonafan (PIN)
[dekafan ma więcej węzłów niż nonafan]

P-44.2.2.2.6.4 Starszy układ liniowego fanu ma niższy lokant(y) superatomu dla starszego amplifikanta [kryterium (d) w P-44.2.2.2.6].

Przykład:



1(4),7(2,5)-dipirydyna-3,5(1,4),10(1)-tribenzenadekafan (PIN)
jest starszy od



1(4),8(4,2)-dipirydyna-3,5(1,4),10(1)-tribenzenadekafan (PIN)

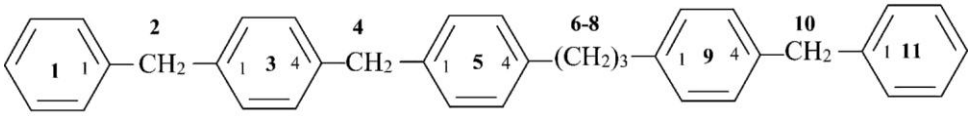
[zespół lokantów ‘1,7’ dla amplifikantów pirydyny jest niższy niż zespół ‘1,8’]

P-44.2.2.2.6.5 Starszy układ liniowego fanu ma niższy lokant(y) superatomu dla wszystkich amplifikantów jako zespołu przy porównaniu każdy z każdym w kolejności rosnącej wartości, a następnie w kolejności wymieniania w nazwie [kryterium (e) w P-44.2.2.2.6].

Przykład:

1,11(1),3,5,7(1,4)-pentabenzenaundekafan (PIN)

jest starszy od

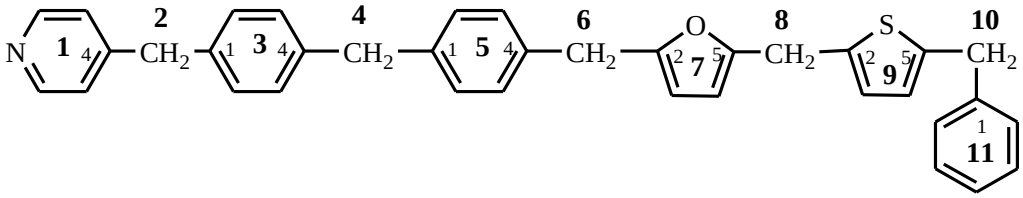


1,11(1),3,5,9(1,4)-pentabenzenaundekafan (PIN)

[zespół lokantów ‘1,3,5,7,11’ dla amplifikantów jest niższy od zespołu ‘1,3,5,9,11’]

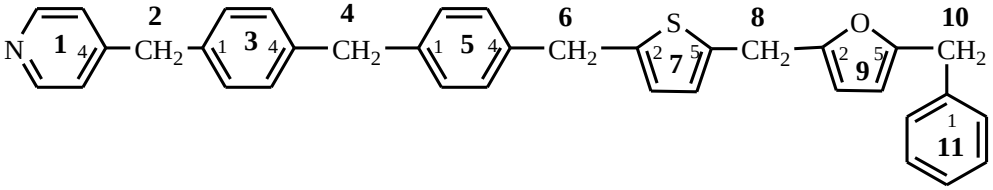
P-44.2.2.2.6.6 Starszy układ liniowego fanu ma niższy lokant(y) superatomu dla wszystkich amplifikantów jako zespołu przy porównaniu w kolejności wymieniania w nazwie [kryterium (f) w P-44.2.2.2.6].

Przykład:



1(4)-pirydyna-7(2,5)-furana-9(2,5)-tiofena-3,5(1,4),11(1)-tribenzenaundekafan (PIN)

jest starszy od

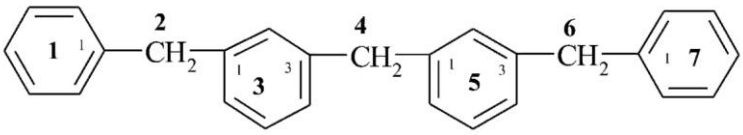


1(4)-pirydyna-9(2,5)-furana-7(2,5)-tiofena-3,5(1,4),11(1)-tribenzenaundekafan (PIN)

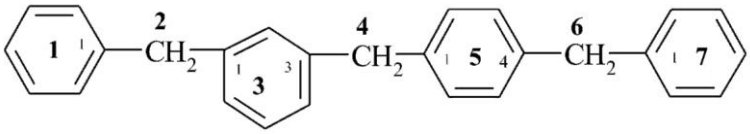
[zespół lokantów dla amplifikantów w porządku występowania w nazwie ‘1,7,9,3,5’ jest niższy od zespołu lokantów ‘1,9,7,3,5’]

P-44.2.2.2.6.7 Starszy układ liniowego fanu ma niższy zestaw lokantów przyłączenia rozważanych jako zespół przy porównaniu znak po znaku w kolejności rosnącej wartości liczbowej [kryterium (g) w P-44.2.2.2.6].

Przykład:



1,7(1),3,5(1,3)-tetrabenzenaheptafan (PIN)
jest starszy od

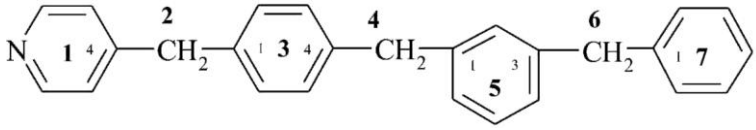


1,7(1),3(1,3),5(1,4)-tetrabenzenaheptafan (PIN)

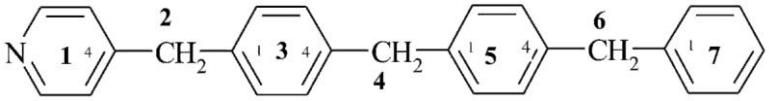
[zestaw lokantów ‘1,1,1,1,3,3’ przyłączenia amplifikantów w rosnącym liczbowo porzadku jest niższy od zestawu ‘1,1,1,1,3,4’]

P-44.2.2.2.6.8 Starszy układ liniowego fanu ma niższy zestaw lokantów przyłączenia przy porównaniu znak po znaku w kolejności ich wymieniania w nazwie [kryterium (h) w P-44.2.2.2.6].

Przykład:



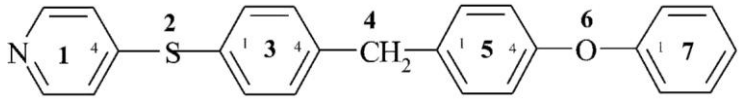
1(4)-pirydyna-3(1,4),5(1,3),7(1)-tribenzenaheptafan (PIN)
jest starszy od



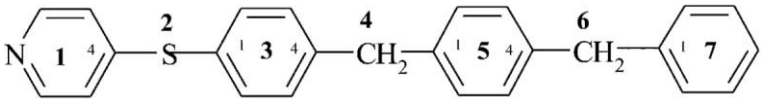
1(4)-pirydyna-3,5(1,4),7(1)-tribenzenaheptafan (PIN)
[zestaw lokantów ‘4,1,4,1,3,1’ amplifikantów w kolejności ich wymieniania w nazwie jest niższy od ‘4,1,4,1,4,1]

P-44.2.2.2.6.9 Starszy układ liniowego fanu ma większą liczbę heteroatomów wprowadzonych nomenklaturą zamienną (a) szkieletu, bez względu na ich rodzaj [kryterium (i) w P-44.2.2.2.6].

Przykład:



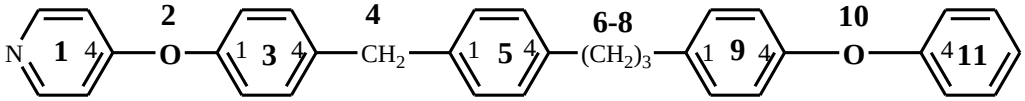
6-oksa-2-tia-1(4)-pirydyna-3,5(1,4),7(1)-tribenzenaheptafan (PIN)
jest starszy od



2-tia-1(4)-pirydyna-3,5(1,4),7(1)-tribenzenaheptafan (PIN)
[dwa heteroatomy wprowadzonę nomenklaturą zamienną (a) szkieletu są starsze od jednego takiego heteroatomu]

P-44.2.2.2.6.10 Starszy układ liniowego fanu ma większą liczbę heteroatomów wprowadzonych nomenklaturą zamienną (a) szkieletu wymienianych wcześniej w następującym porządku: F > Cl > Br > I > O > S > Se > Te > N > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al. > Ga > In > Tl. [kryterium (j) w P-44.2.2.2.6].

Przykład:

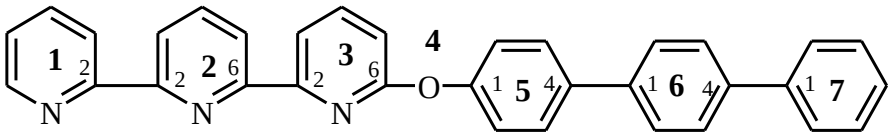


2,10-dioksa-1,11(4)-dipirydyna-3,5,9(1,4)-tribenzenaundekafan (PIN)
jest starszy od

2-oksa-10-tia-1,11(4)-dipirydyna-3,5,9(1,4)-tribenzenaundekafan (PIN)
[dwa atomy tlenu są starsze od jednego atomu tlenu i jednego atomu siarki]

P-44.2.2.2.7 Kryteria starszeństwa dla zespołów pierścieni opierają się na odpowiednich kryteriach dla pierścieni i układów pierścieni podanych w P-44.2.1.2. Nomenklatura fanów jest używana kiedy dwa zespoły pierścieni są połączone przez atomy albo łańcuchy z utworzeniem układu z conajmniej siedmioma węzłami i dwoma końcowymi pierścieniami lub układami pierścieni.

Przykład:



4-oksa-1(2),2,3(2,6)-tripirydyna-5,6(1,4),7(1)-tribenzenaheptafan (PIN)
1^6-([1^1,2^1:2^4,3^4]terfenyl-1^4-yloksy)-1^2,2^2:2^6,3^2-terpirydyna;
kryteria nomenklatury fanów (patrz P-51.4) są spełnione w nazwie PIN]

Następujące reguły starszeństwa dla zespołów pierścieni stosuje się kolejno aż do osiągnięcia jenoznaczności:

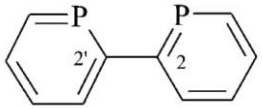
(a) pierścienie zawierające jakikolwiek heterocykl;
(b) pierścienie zawierające atom azotu;

(c) w nieobecności atomu azotu, pierścienie zawierające conajmniej jeden heteroatom wymienia się w następującej kolejności: F > Cl > Br > I > O > S > Se > Te > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al. > Ga > In > Tl;
(d) większą liczbę pierścieni;
(e) większą liczbę atomów;
(f) większą liczbę heteroatomów dowolnego rodzaju;
(g) większą liczbę heteroatomów wymienianych jako pierwsze w następującej kolejności: F > Cl > Br > I > O > S > Se > Te > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al. > Ga > In > Tl.

Dalsze kryteria mające zastosowanie do zespołów pierścieni znajdują się w P-4.44.

P-44.2.2.2.7.1 Starszy zespół pierścieni jest utworzony z pierścieni zawierających jakikolwiek heterocykl [kryterium (a) w P-44.2.2.2.7].

Przykład (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):



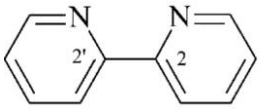
2,2′-bifosfinin (PIN)

>

$1^1,2^1{:}2^4,3^1$-terfenyl (PIN)
1,1′:4,1″-terfenyl

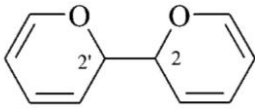
P-44.2.2.2.7.2 Starszy zespół pierścieni jest utworzony z pierścieni zawierających atomy azotu [kryterium (b) w P-44.2.2.2.7].

Przykład (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):



2,2′-bipirydyna (PIN)

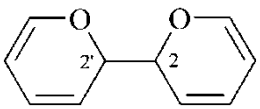
>



2*H*,2′*H*-2,2′-bipiran (PIN)

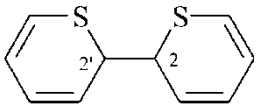
P-44.2.2.2.7.3 Starszy zespół pierścieni w nieobecności atomu azotu jest utworzony z pierścieni zawierających conajmniej jeden hetroatom wymieniany jako pierwszy w następującej kolejności: F > Cl > Br > I > O > S > Se > Te > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al. > Ga > In > Tl [kryterium (c) w P-44.2.2.2.7].

Przykład (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):



2*H*,2′*H*-2,2′-bipiran (PIN)

>

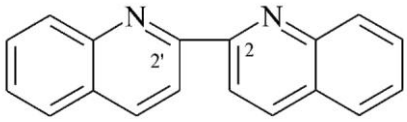


2*H*,2′*H*-2,2′-bitiopiran (PIN)

[jeden atom tlenu nz pierścien jest preferowany wobec jednego atomu siarki na pierścień]

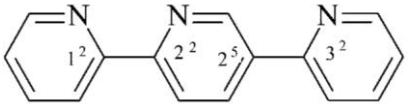
P-44.2.2.2.7.4 Starszy zespół pierścieni jest utworzony z większej liczby pierścieni [kryterium (d) w P-44.2.2.2.7].

Przykład (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):



2,2′-bichinolina (PIN)

>

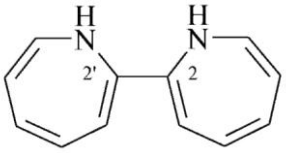


$1^2,2^2:2^5,3^2$-terpirydyna (PIN)
2,2′,2″-terpirydyna

[układ pierścieni zawierający dwa pierścienie jest starszy od układu pierścieni zawierającego jeden pierścień]

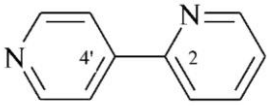
P-44.2.2.2.7.5 Starszy zespół pierścieni jest utworzony z większej liczby atomów [kryterium (e) w P-44.2.2.2.7].

Przykład (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):



1*H*,1′*H*-2,2′-biazepina (PIN)

>

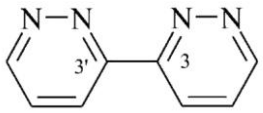


2,4′-bipirydyna (PIN)

[siedem atomów w pierścieniu jest preferowane wobec sześciu atomów w pierścieniu]

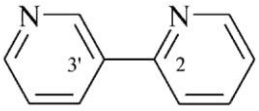
P-44.2.2.2.7.6 Starszy zespół pierścieni jest utworzony z większej liczby heteroatomów dowolnego rodzaju [kryterium (f) w P-44.2.2.2.7].

Przykład (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):



3,3′-bipirydazyna (PIN)

>

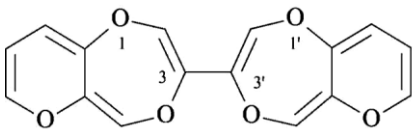


2,3′-bipirydyna (PIN)

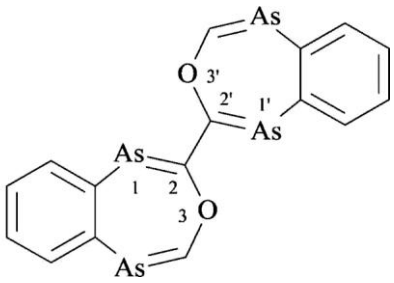
[dwa heteroatomy w pierścieniu są preferowane wobec jednego atomu w pierścieniu]

P-44.2.2.2.7.7 Starszy zespół pierścieni jest utworzony z większej liczby heteroatomów wymienianych jako pierwsze w następującej kolejności: F > Cl > Br > I > O > S > Se > Te > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al. > Ga > In > Tl [kryterium (g) w P-44.2.2.2.7].

Przykład (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):



>



3,3′-bipirano[3,2-*e*][1,4]dioksepin (PIN) 2,2′-bi-3,1,5-benzooksadiarsepin (PIN)

[trzy atomy tlenu w pierścieniu są preferowane wobec jednego atomu tlenu w pierścieniu]

P-44.3 STARSZEŃSTWO ŁAŃCUCHÓW ACYKLICZNYCH (ŁAŃCUCH GŁÓWNY)

W acyklicznych związkach składających się z pojedynczych atomów, takich samych lub różnych (acykliczny łańcuch), łańcuch, na którym opiera się nomenklatura i numeracja nazywa się ‘łańcuchem głównym’. Kiedy istnieje możliwość wyboru głównego łańcucha, stosuje się następujące kryteria, w podanej kolejności, aż do rozstrzygnięcia.

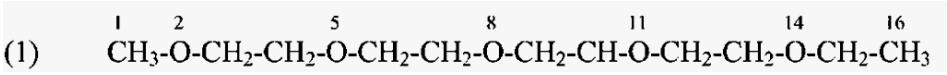
Łańcuch główny:

(a) zawiera większą liczbę heteroatomów dowolnego rodzaju;
(b) ma większą liczbę atomów szkieletu;
(c) zawiera większą liczbę najstarszych heteroatomów w następującej kolejności: F > Cl > Br > I > O > S > Se > Te > N > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al > Ga > In > Tl.

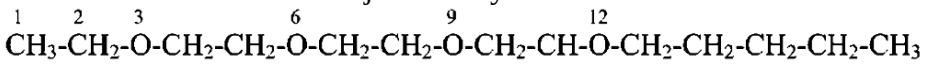
Każde z tych kryteriów jest ilustrowane poniżej przykładami w podrozdziałach od P-44.3.1 do P-44.3.3.
Dalsze kryteria stosujące się do acyklicznych łańcuchów znajdują się w P-44.4.

P-44.3.1 Łańcuch główny zawiera większą liczbę heteroatomów dowolnego rodzaju [kryterium (a) w P-44.3]

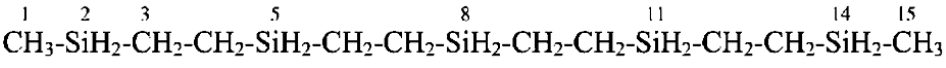
Przykłady:

(1) 

2,5,8,11,14-pentaoksaheksadekan (PIN)
jest starszy od

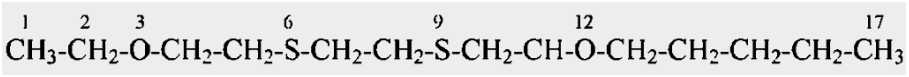


3,6,9,12-tetraoksaheptadekan (PIN)
[pięć heteroatomów to więcej niż cztery]

(2) 

2,5,8,11,14-pentasilapentadekan (PIN)

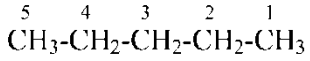
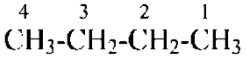
jest starszy od



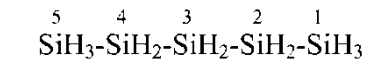
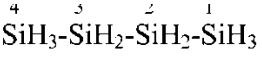
3,12-dioksa-6,9-ditiaheptadekan (PIN)
[pięć heteroatomów to jest więcej od czterech]

P-44.3.2 Łańcuch główny ma większą liczbę atomów szkieletu [kryterium (b) w P-44.3]

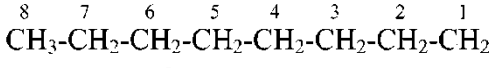
Przykłady (symbol > oznacza 'jest starszy od'):

(1)  > 

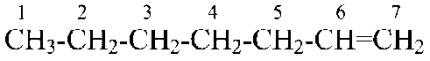
pentan (PIN) butan (PIN)
[pięć atomów szkieletu to więcej niż cztery]

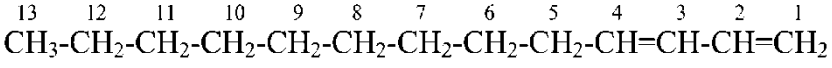
(2)  > 

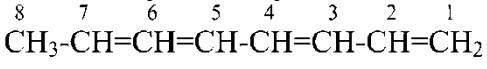
pentasilan tetrasilan
(nazwa wstępnie wybrana; patrz P-12.2) (nazwa wstępnie wybrana; patrz P-12.2)
[pięć atomów szkieletu to jest więcej od czterech]

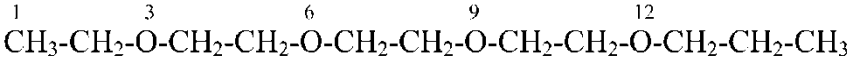
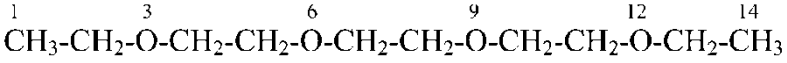
(3) 
oktan (PIN)

jest starszy od

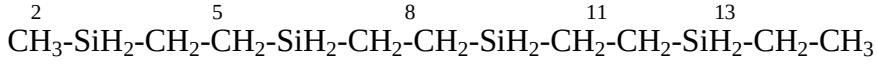

hept-1-en (PIN)
[osiem atomów szkieletu jest większe od siedmiu]

(4) 
trideka-1,3-dien (PIN)

jest starszy od

okta-1,3,5,6-tetraen (PIN)
[trzynaście atomów szkieletu to więcej niż osiem]

(5) 
3,6,9,12-tetraoksapentadekan (PIN)
jest starszy od


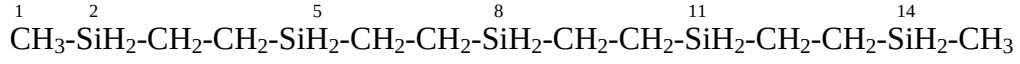
[cztery heteroatomy w każdym łańcuchu i piętnaście atomów szkieletu to więcej niż czternaście]

(6) 

2,5,8,11-tetrasilatridekan (PIN)
jest starszy od

SiH_3-SiH_2-SiH_2-SiH_3
tetrasilan (nazwa wstępnie wybrana; patrz P-12.2)

[cztery heteroatomy w każdym łańcuchu i trzynaście atomów szkieletu to więcej niż czternaście]

(7) 

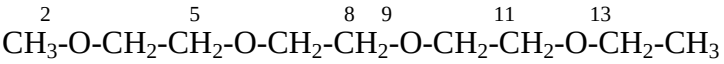
2,5,8,11,14-pentasilapentadekan (PIN)
jest starszy od

SiH_3-O-SiH_2-O-SiH_3
trisiloksan (nazwa wstępnie wybrana; patrz P-12.2)

[pięć heteroatomów w każdym łańcuchu i szesnaście atomów szkieletu jest większe niż pięć]

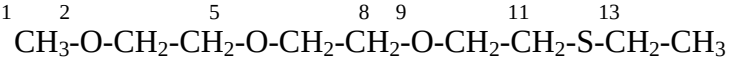
P-44.3.3 Łańcuch główny zawiera większą liczbę starszych heteroatomów w następującej kolejności: F > Cl > Br > I > O > S > Se > Te > N > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al. > Ga > In > Tl [kryterium (c) w P-44.3]

Przykłady (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):

(1) 

2,5,8,11-tetraoksatridekan (PIN)

jest starszy od



2,5,8-trioksa-11-tiatridekan (PIN)

[cztery atomy tlenu jest więcej niż trzy]

(2) SiH_3-O-SiH_3 > SiH_3-S-SiH_3

disiloksan (nazwa wstępnie wybrana; patrz P-12.2)

disilatian (nazwa wstępnie wybrana; patrz P-12.2)

[atom tlenu jest starszy od atomu siarki]

(3) SiH_3-O-SiH_3 > SiH_3-SiH_2-SiH_3

disiloksan (nazwa wstępnie wybrana; patrz P-12.2)

trisilan (nazwa wstępnie wybrana; patrz P-12.2)

[atom tlenu jest starszy od atomu krzemu]

P-44.4 KRYTERIA STARSZEŃSTWA STOSUJĄCE SIĘ DO PIERŚCIENI, UKŁADÓW PIERŚCIENI LUB ŁAŃCUCHÓW

P-44.4.1 Jeżeli kryteria podane od P-44-1 do P-44.3, tam gdzie mogą być zastosowane, nie prowadzą do wyboru starszej macierzystej struktury, stosuje się kolejno następujące kryteria aż do osiągnięcia jednoznaczności. Przykłady ilustrujące te kryteria podane są w podrozdziałach od P-44.1.1 do P-44.1.12.

Starszy pierścień, układ pierścieni lub łańcuch główny:

(a) ma większą liczbę wiązań wielokrotnych (P-44.4.1.1);
(b) ma większą liczbę wiązań podwójnych (p-44.4.1.2);
(c) ma jeden lub więcej atomów o niestandardowej wiązalności (P-44.4.1.3;
(d) ma niższy lokant wskazanego atomu wodoru (P-44.4.1.4);
(e) ma niższe lokanty heteroatomów, wprowadzonych nomenklaturą zamienną (a) szkieletu, jako zespołu (P-44.4.1.5);
(f) ma niższe lokanty heteroatomów wprowadzonych nomenklaturą zamienną (a) szkieletu w porządku: F > Cl > Br > I > O > S > Se > Te > N > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al > Ga > In > Tl (P-44.4.1.6);
(g) ma niższy lokant(y) atomów węgla w miejscach skondensowania (P-44.4.1.7);
(h) ma niższy lokant grupy charakterystycznej wyrażonej przyrostkiem (P-44.4.1.8);
(i) ma niższy lokant miejsca przyłączenia (jeżeli jest podstawnikiem) (P-44.4.1.9);
(j) ma niższy lokant(y) końcówek albo przedrostków wyrażających zmiany stopnia uwodornienia, na przykład, końcówki ‘en’ i ‘yn’ i przedrostki hydro/dehydro (P-44.4.1.10);
(k) ma jeden lub więcej atomów modyfikowanych izotopowo (P-44.4.1.11);
(l) ma jedno lub więcej centrów stereogenicznych (P-44.4.1.12).

P-44.1.1 Starszy pierścień, układ pierścieni lub łańcuch główny ma większą liczbę wiązań wielokrotnych; do celów tego kryterium pierścienie i układy pierścieni ‘mancude’ są uznawane jako zawierające nieskumulowane podwójne wiązania [kryterium (a) w P-44.1].

Przykłady (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):

(1) > >

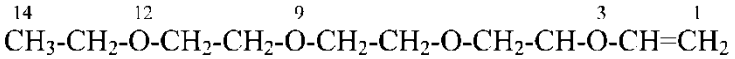
benzen (PIN) cykloheksen (PIN) cykloheksan (PIN)

[trzy podwójne wiązania to więcej niż jedno podwójne wiązanie, a ono jest więcej niż zero]

(2)

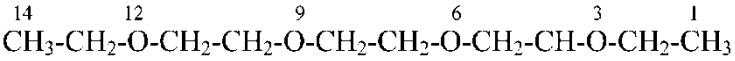
pent-3-en-1-yn (PIN) > pent-2-en (PIN)

[dwa wiązania wielokrotne to więcej niż jedno]

(3) 

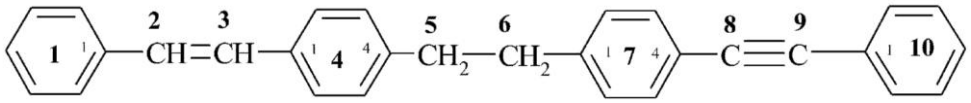
3,6,9,12-tetraoksatetradec-1-en (PIN)

jest starszy od



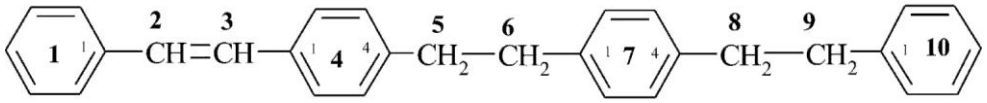
3,6,9,12-oksatetradekan (PIN)

[jedno wiązanie podwójne to więcej niż zero]

(4) 

1,10(1),4,7(1,4)-tetrabenzenadekafan-2-en-8-yn (PIN)

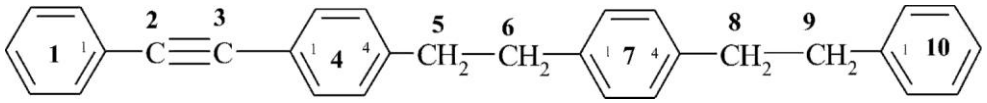
jest starszy od



1,10(1),4,7(1,4)-tetrabenzenadekafan-2-en (PIN)

[dwa wielokrotne wiązania są starsze od jednego wielokrotnego wiązania]

albo od

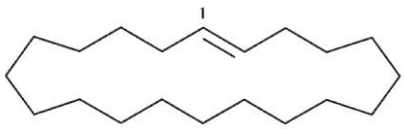
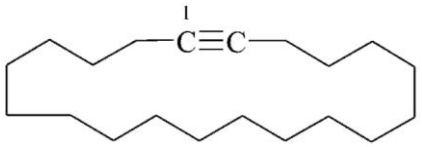


1,10(1),4,7(1,4)-tetrabenzenadekafan-2-yn (PIN)

[jedno podwójne wiązanie jest starsze od jednego potrójnego wiązania]

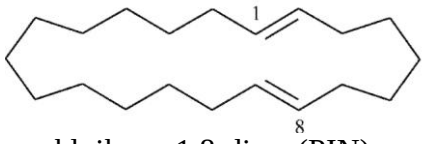
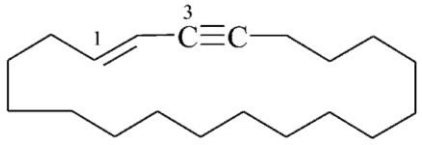
P-44.4.1.2 Starszy pierścień, układ pierścieni lub łańcuch główny ma większą liczbę wiązań podwójnych [kryterium (b) w P-44.1].

Przykłady (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):

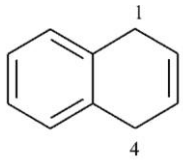
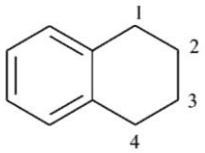
(1)  > 

cykloikozen (PIN) cykloikozyn (PIN)

[jedno podwójne wiązanie jest starsze od jednego potrójnego wiązania]

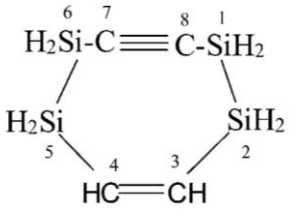
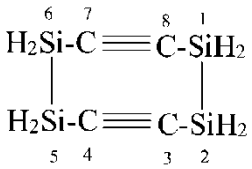
(2)  > 

cykloikoza-1,8-dien (PIN) cykloikoza-1-en-3-yn (PIN)

(3)  > 

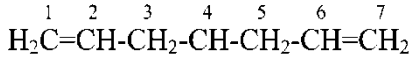
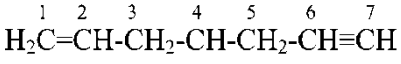
1,4-dihydronaftalen (PIN) 1,2,3,4-tetrahydronaftalen (PIN)

[cztery podwójne wiązania są starsze od trzech]

(4)  jest starszy od 

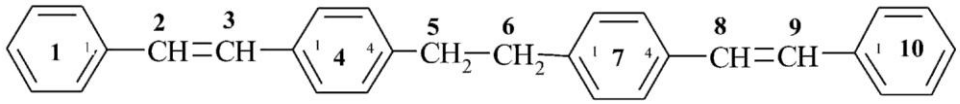
1,2,5,6-tetrasilacyklookta-3-en-7-yn (PIN) 1,2,5,6-tetrasilacyklookta-3,7-diyn (PIN)

[dwa podwójne wiązania są starsze od jednego podwójnego wiązania i jednego potrójnego wiązania ponieważ podwójne wiązanie jest starsze od potrójnego wiązania]

(5)  > 

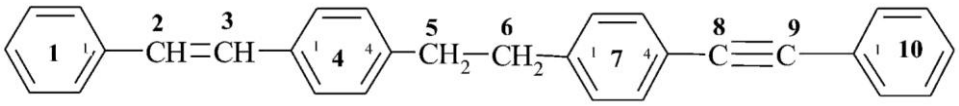
hepta-1,6-dien (PIN) hept-1-en-6-yn (PIN)

[dwa podwójne wiązania są starsze od jednego podwójnego wiązania i jednego potrójnego wiązania ponieważ podwójne wiązanie jest starsze od potrójnego wiązania]

(6) 

1,10(1),4,7(1,4)-tetrabenzenadekafano-2,8-dien (PIN)

jest starszy od



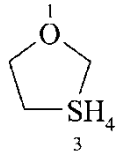
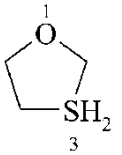
1,10(1),4,7(1,4)-tetrabenzenadekafan-2-en-8-yn (PIN)

[dwa podwójne wiązania są starsze od jednego podwójnego wiązania i jednego potrójnego wiązania ponieważ podwójne wiązanie jest starsze od potrójnego wiązania]

P-44.4.1.3 Starszy pierścień, układ pierścieni lub łańcuch główny ma jeden lub więcej atomów o niestandardowej wiązalności [kryterium (c) w P-44.4.1). Jeśli są możliwości wyboru, następujące kryteria są stosowane aż do rozstrzygnięcia.

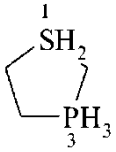
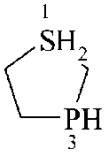
P-44.4.1.3.1 Jeśli trzeba dokonać wyboru pomiędzy dwoma łańcuchami lub dwoma pierścieniami lub dwoma układami pierścieni mającymi atomy szkieletu o niestandardowej wiązalności, jako główny łańcuch, starszy pierścień lub układ pierścieni, wybiera się mający maksymalną liczbę atomów o niestandardowej wiązalności. Jeśli nadal konieczny jest wybór pomiędzy takim samym atomem szkieletu o różnej niestandardowej wiązalności, preferuje się jako starszą macierzystą strukturę tę, która ma wyższe wiązalności, na przykład, λ^6 jest starsze od λ^2.

Przykłady (symbol > oznacza 'jest starszy od'):

(1)  > 

1,3λ^6-tioksolan (PIN) 1,3λ^4-tioksolan (PIN)

[niestandardowa wiązalność λ^6 jest starsza od λ^4]

(2)  > 

1λ^4,3λ^5-tiafosfolan (PIN) 1λ^5,3-tiafosfolan (PIN)

[dwa atomy o niestandardowej wiązalności są starsze od jednego]

(3) $^{1}SiH_3$-$^{2}SH_4$-$^{3}SiH_3$ > $^{1}SiH_3$-^{2}S-$^{3}SiH_3$

1λ^6-disilatian disilatian

(nazwa wstępnie wybrana; patrz P-12.2) (nazwa wstępnie wybrana; patrz P-12.2)

[niestandardowa wiązalność λ^6 jest starsza od standardowej wiązalności 2λ^2]

(4) $^{2}PH_2$-$^{1}PH_4$ > $^{1}PH_2$-$^{2}PH_2$

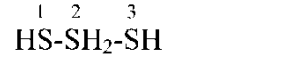
1λ^5-difosfan difosfan

(nazwa wstępnie wybrana; patrz P-12.2) (nazwa wstępnie wybrana; patrz P-12.2)

[niestandardowa wiązalność λ^5 jest starsza od standardowej wiązalności 3λ^3]

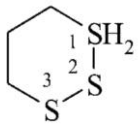
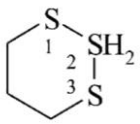
P-44.4.1.3.2 Jeśli trzeba dokonać wyboru pomiędzy dwoma łańcuchami lub dwoma pierścieniami lub dwoma układami pierścieni mającymi atomy szkieletu o niestandardowej wiązalności, wybiera się jako łańcuch główny, starszy pierścień lub układ pierścieni ten, który ma najniższy lokant(y) atomu(ów) o niestandardowej wiązalności. Jeśli nadal konieczny jest wybór, preferowany jest ten, który ma najwyższą wiązalność atomu o najniższym lokancie.

Przykłady (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):

(1) > 

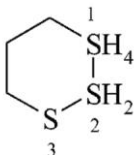
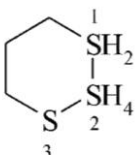
$1\lambda^4$-trisulfan (nazwa wstępnie wybrana; patrz P-12.2) > $2\lambda^4$-trisulfan (nazwa wstępnie wybrana; patrz P-12.2)

[lokant ‘1’ atomu o niestandardowej wiązalności jest niższy od ‘2’]

(2)  > 

$1\lambda^4$,2,3-tritian (PIN) $1,2\lambda^4$,3-tritian (PIN)

[lokant ‘1’ atomu o niestandardowej wiązalności jest niższy od ‘2’]

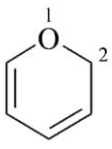
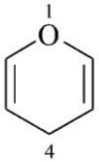
(3)  > 

$1\lambda^6,2\lambda^4$,3-tritian (PIN) $1\lambda^4,2\lambda^6$,3-tritian (PIN)

[zestawy lokantów ‘1,2’atomów o niestandardowych wiązalności są takie same, ale z porównanie zestawu cyfr arabskich w indeksie górnym, wskazujących na rzeczywisty stan niestandardowej wiązalności, wynika, że zestaw cyfr ‘6,4’ jest starszy od ‘4,6’]

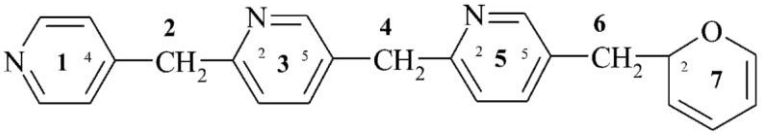
P-44.4.1.4 Starszy pierścień lub układ pierścieni ma najniższe lokanty wskazanego atomu wodoru [kryterium (d) w P-44.4.1.4].

Przykłady (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):

(1)  > 

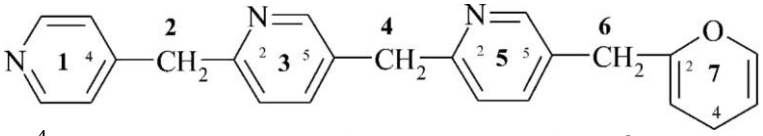
2*H*-piran (PIN) > 4*H*-piran (PIN)

[‘2*H*’ jest niższe od ‘4*H*’]

(2) 

7^{2}*H*-1(4),3,5(2,5)-tripirydyna-7(2)-piranaheptafan (PIN)

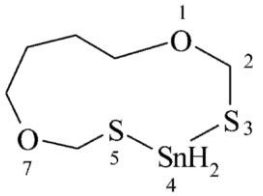
jest starszy od



7^{4}*H*-1(4),3,5(2,5)-tripirydyna-7(2)-piranaheptafan (PIN)
[‘7^{2}*H*’ jest niższe od *‘7^{4}H’]*

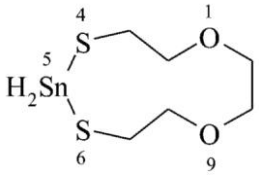
P-44.4.1.5 Starszy pierścień, układ pierścieni lub łańcuch główny ma niższe lokanty heteroatomów, wprowadzonych nomenklaturą zamienną (a) szkieletu, jako zespołu, [kryterium (e) w P-44.4.1].

Przykłady (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):

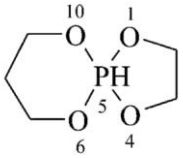
(1) 

1,7-dioksa-3,5-ditia-4-stannacykloundekan (PIN)

jest starszy od

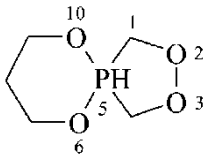


1,9-dioksa-4,6-ditia-5-stannacykloundekan (PIN)
[zestaw lokantów heteroatomów ‘1,3,4,5,7’ jest niższy od ‘1,4,5,6,9’]

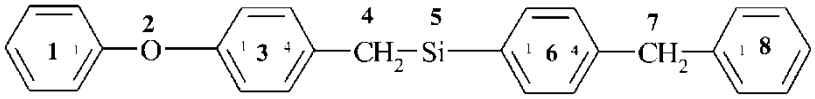
(2) 

1,4,6,10-tetraoksa-5λ^{5}-fosfaspiro[4.5]dekan (PIN)

jest starszy od

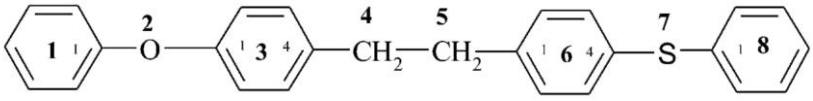


2,3,6,10-tetraoksa-5λ^5-fosfaspiro[4.5]dekan (PIN)
[zestaw lokantów heteroatomów ‘1,4,5,6,10’ jest niższy od ‘2,3,5,6,10’]

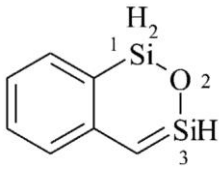
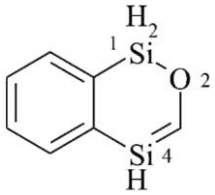
(3) 

2-oksa-5-sila-1,8(1),3,6(1,4)tetrabenzenaoktafan (PIN)

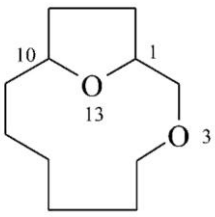
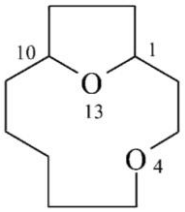
jest starszy od



2-oksa-7-tia-1,8(1),3,6(1,4)-tetrabenzenaoktafan (PIN)
[zestaw lokantów heteroatomów ‘2,5’ jest niższy od ‘2,7’]

(4)  > 

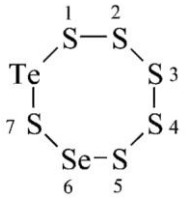
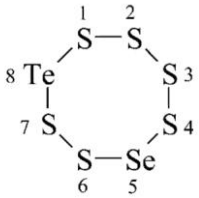
1*H*-2,1,3-benzooksadisilin PIN) 1*H*-2,1,4-benzooksasilin PIN)
[zestaw lokantów heteroatomów ‘1,2,3’ jest niższy od ‘1,2,4’]

(5)  > 

3,13-dioksabicyklo[8.2.1]tridekan (PIN) 4,13-dioksabicyklo[8.2.1]tridekan (PIN)
[zestaw lokantów heteroatomów ‘3,13’ jest niższy od ‘4,13’]

P-44.4.1.6 Starszy pierścień, układ pierścieni lub łańcuch główny ma niższe lokanty heteroatomów wprowadzonych nomenklaturą zamienną (a) szkieletu w porządku: F > Cl > Br > I > O > S > Se > Te > N > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al > Ga > In > Tl [kryterium (f) w P-44.4.1].

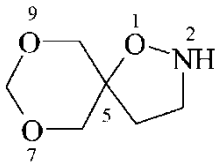
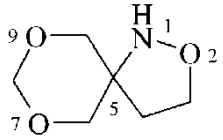
Przykłady (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):

(1)  > 

1,2,3,4,5,7,6,8-heksatiaselenatellurokan (nazwa wstępnie wybrana; patrz P-12.2)

1,2,3,4,6,7,5,8-heksatiaselenatellurokan (nazwa wstępnie wybrana; patrz P-12.2)

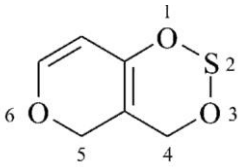
[zestaw lokantów heteroatomów ’1,2,3,4,5,7’] jest niższy od ‘1,2,3,4,6,7’]

(2)  > 

1,7,9-trioksa-2-azaspiro[4.5]dekan (PIN*)*

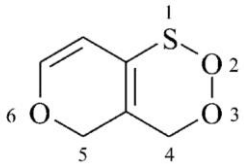
2,7,9-trioksa-1-azaspiro[4.5]dekan (PIN)

[zestaw lokantów heteroatomów ‘1,7’9’2” w porządku ich wymieniania w nazwie jest niższy od ‘2,7,9,1’]

(3) 

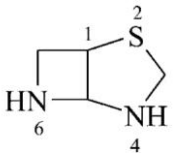
4*H*,5*H*-pirano[4,3-*d*][1,3,2]dioksatiin (PIN)

jest starszy od



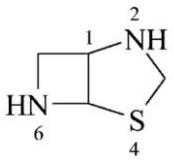
4*H*,5*H*-pirano[4,3-*d*][2,3,1]dioksatiin (PIN)

[zestaw lokantów ‘1,3,6’ dla starszych atomów tlenu jest niższy od ‘2,3,6’]

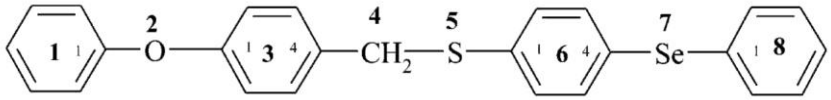
(4) 

2-tia-4,6-diazabicyklo[3.2.0]heptan (PIN)

jest starszy od

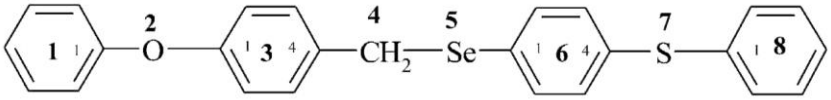


4-tia-2,6-diazabicyklo[3.2.0]heptan (PIN)
[lokant ‘2’ starszego atomu, siarki, jest niższy od ‘4’]

(5) 

2-oksa-5-tia-7-selena-1,8(1),3,6(1,4)-tetrabenzenaoktafan (PIN)

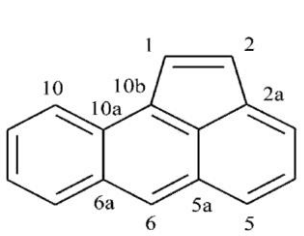
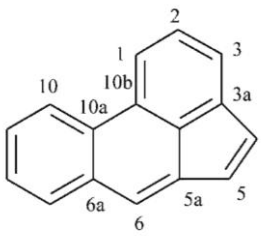
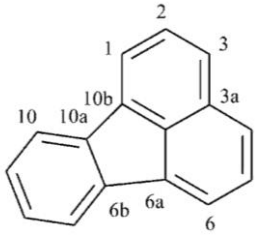
jest starszy od



2-oksa-5-selena-7-tia-1,8(1),3,6(1,4)-tetrabenzenaoktafan (PIN)
[atom ‘S’ > ‘Se’ przy lokancie ‘5’]

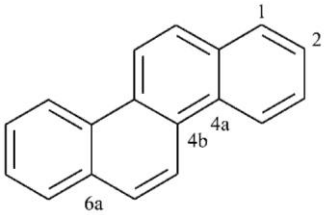
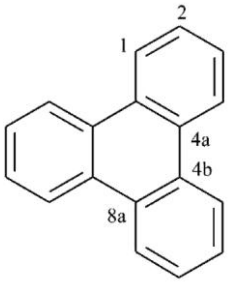
P-44.4.1.7 Starszy układ pierścieni skondensowanych ma niższy lokant(y) atomu węgla w pozycji skondensowania [kryterium (g) w P-44.4.1].

Przykłady (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):

(1)  >  > 

(I) aceantrylen (PIN) **(II)** acefenantrylen (PIN) **(III)** fluoranten (PIN)

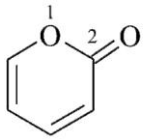
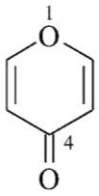
[lokant ‘2a’ pozycji skondensowania w (**I**) jest niższy od ‘3a’ w (**II**) i zestaw lokantów ‘3a,5a’ w pozycjach skondensowania w (**II**) jest niższy od ‘3a,6a’ w (**III**)]

(2)  > 

chryzen (PIN) trifenylen (PIN)
[zestaw lokantów ‘4a,4b,6a’ pozycji skondensowania jest niższy od ‘4a,4b,8a’]

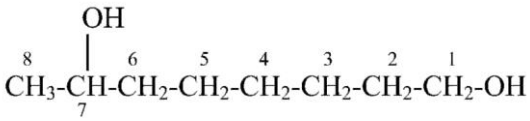
P-44.4.1.8 Starszy pierścień, układ pierścieni lub łańcuch główny ma niższy lokant grupy charakterystycznej wyrażonej przyrostkiem [kryterium (h) w P-44.4.1).

Przykłady (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):

(1)  > 

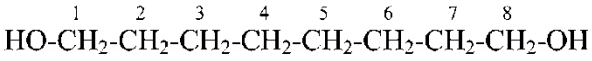
2*H*-piran-2-on (PIN) 4*H*-piran-4-on (PIN)

[lokant ‘2’ głównej grupy charakterystycznej jest niższy od ‘4’]

(2) 

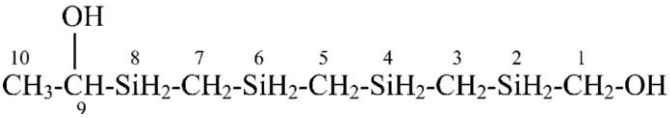
oktano-1,7-diol (PIN)

jest starszy od



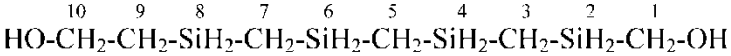
oktano-1,8-diol (PIN)

[zestaw lokantów ‘1,7’ głównej grupy charakterystycznej jest niższy od ‘1,8’]

(3) 

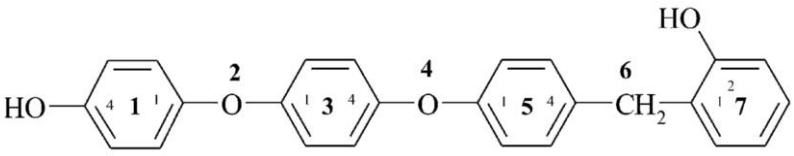
2,4,6,8-tetrasiladekano-1,9-diol (PIN)

jest starszy od



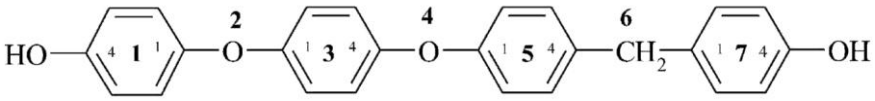
2,4,6,8-tetrasiladekano-1,10-diol (PIN)

[zestaw lokantów ‘1,9’ głównej grupy charakterystycznej jest niższy od ‘1,10’]

(4) 

2,4-dioksa-1,7(1),3.5(1,4)-tetrabenzenaheptafano-1^4,7^2-diol (PIN)

jest starszy od



2,4-dioksa-1,7(1),3,5(1,4)-tetrabenzenaheptafano-1^4,7^4-diol (PIN)
(zestaw lokantów głównej grupy charakterystycznej '7^2' jest niższy niż '7^4')

P-44.4.1.9 Starszy pierścień lub układ pierścieni ma niższy lokant miejsca przyłączenia (jeżeli jest podstawnikiem) [kryterium (i) w P-44.4.1].

Przykłady (symbol > oznacza 'jest starszy od'):

pirydyn-2-yl (PIN) > pirydyn-3-yl (PIN)

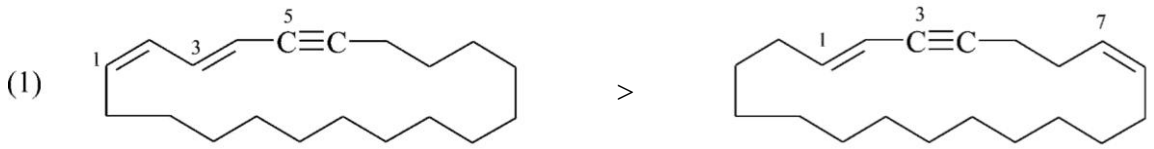
[lokant pozycji przyłączenia '2' jest niższy od '3']

P-44.1.10 Starszy pierścień, układ pierścieni lub łańcuch główny ma niższy lokant(y) końcówek albo przedrostków wyrażających zmiany w stopniu uwodornienia, na przykład, końcówki 'en' i 'yn' i przedrostki hydro/dehydro [kryterium (j) w P-44.4.1]

Przedrostki hydro lub dehydro wprowadza się do nazwy w operacji addycji lub subtrakcji; dlatego nie są one włączone do kategorii alfabetyzowalnych rozłącznych przedrostków wskazujących podstawienie (P-15.1.3). W nazwie zajmują miejsce pomiędzy nierozłącznymi przedrostkami i alfabetyzowalnymi rozłącznymi przedrostkami. Przedrostki hydro lub dehydro wyrażają modyfikację stopnia uwodornienia pierścienia lub układu pierścieni mających maksymalną liczbę nieskumulowanych wiązań podwójnych (struktura mancude) i traktuje się je w numerowaniu jak końcówki 'en' i 'yn', które spełniają taką samą rolę. W nazwach, kiedy występują oba, przedrostek 'dehydro' poprzedza przedrostek 'hydro'. Z 'hydro' i 'dehydro' stosuje się proste określenia liczbowe, takie jak 'di', 'tetra', etc.

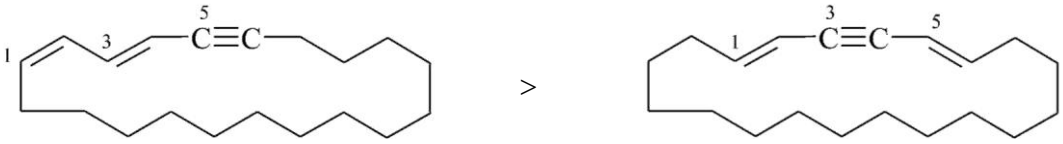
P-44.4.1.10.1 Końcówkom 'en' i 'yn' wyznacza się niższe lokanty, najpierw końcówkom niezależnie od rodzaju, jako zespołowi, a następnie końcówkom 'en'.

Przykłady (symbol > oznacza 'jest starszy od'):



cykloikoza-1,3-dien-5-yn (PIN) > cykloikoza-1,7-dien-3-yn (PIN)

[zestaw lokantów '1,3,5' dla końcówek 'en' i 'yn' jest niższy od '1,3,7']

(2)  >

cykloikoza-1,3-dien-5-yl (PIN) cykloikoza-1,5-dien-3-yl (PIN)

[zestaw lokantów ‘1,3’ końcówki ‘en’ jest niższy od ‘1,5’]

(3) $^{11}CH_3\text{-}^{10}CH_2\text{-}^{9}CH_2\text{-}^{8}C\equiv^{7}C\text{-}^{6}CH_2\text{-}^{5}CH=^{4}CH\text{-}^{3}CH=^{2}CH\text{-}^{1}CH_3$

undeka-2,4-dien-7-yn (PIN)

jest starszy od

$^{11}CH_3\text{-}^{10}CH_2\text{-}^{9}C\equiv^{8}C\text{-}^{7}CH_2\text{-}^{6}CH_2\text{-}^{5}CH=^{4}CH\text{-}^{3}CH=^{2}CH\text{-}^{1}CH_3$

undeka-2,4-dien-8-yn (PIN)

[zestaw lokantów ‘2,4,7’ dla końcówek ‘en’ i ‘yn’ jest niższy od ‘2,4,8’]

(4) $^{1}H_2C=^{2}CH\text{-}^{3}CH_2\text{-}^{4}CH=^{5}CH\text{-}^{6}CH_3$ > $^{1}H_2C=^{2}CH\text{-}^{3}CH_2\text{-}^{4}CH_2\text{-}^{5}CH=^{6}CH_2$

heksa-1,4-dien (PIN) heksa-1,5-dien (PIN)

[zestaw lokantów końcówek ‘en’‘1,4’ jest niższy od ‘1,5’]

(5) $HO\text{-}^{11}CH_2\text{-}^{10}C\equiv^{9}C\text{-}^{8}CH=^{7}CH\text{-}^{6}CH_2\text{-}^{5}CH=^{4}CH\text{-}^{3}CH=^{2}CH\text{-}^{1}CH_2\text{-}OH$

undeka-2,4,7-trien-9-yn (PIN)

jest starszy od

$HO\text{-}^{11}CH_2\text{-}^{10}CH=^{9}CH\text{-}^{8}C\equiv^{7}C\text{-}^{6}CH_2\text{-}^{5}CH=^{4}CH\text{-}^{3}CH=^{2}CH\text{-}^{1}CH_2\text{-}OH$

undeka-2,4,9-trien-7-yn (PIN)

[zestaw lokantów końcówek ‘en’‘2,4,7’ jest niższy od ‘2,4,9’]

(6) $^{1}H_3C\text{-}^{2}CH_2\text{-}^{3}S\text{-}^{4}CH_2\text{-}^{5}CH_2\text{-}^{6}S\text{-}^{7}CH_2\text{-}^{8}CH_2\text{-}^{9}CH_2\text{-}^{10}S\text{-}^{11}CH_2\text{-}^{12}CH_2\text{-}^{13}S\text{-}^{14}CH=^{15}CH\text{-}^{16}CH_3$

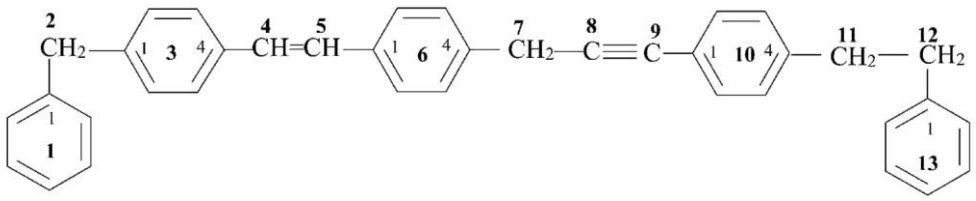
3,6,10,13-tetratiaheksadec-14-en (PIN)

jest starszy od

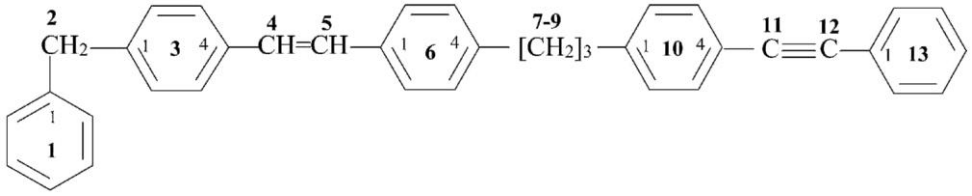
$^{1}H_3C\text{-}^{2}CH_2\text{-}^{3}S\text{-}^{4}CH_2\text{-}^{5}CH_2\text{-}^{6}S\text{-}^{7}CH_2\text{-}^{8}CH_2\text{-}^{9}CH_2\text{-}^{10}S\text{-}^{11}CH_2\text{-}^{12}CH_2\text{-}^{13}S\text{-}^{14}CH_2\text{-}^{15}CH=^{16}CH_3$

3,6,10,13-tetratiaheksadec-15-en (PIN)

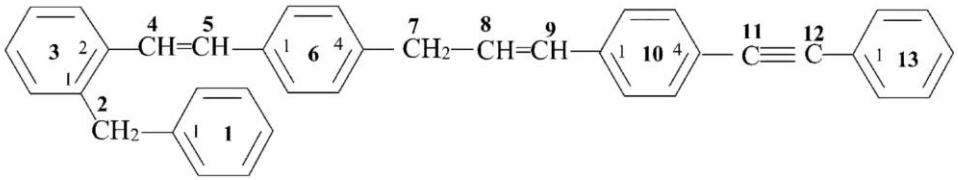
[lokant ‘14’ końcówki ‘en’ jest niższy od ‘15’]

(7) 

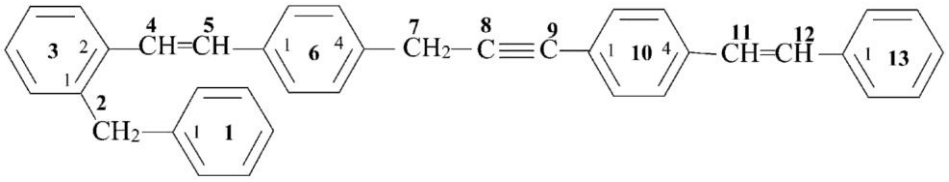
1,13(1),3,6,10(1,4)-pentabenzenatridekafan-4-en-8-yn (PIN)
jest starszy od



1,13(1),3,6,10(1,4)-pentabenzenatridekafan-4-en-11-yn (PIN)
[zestaw lokantów ‘4,8’ końcówek ‘en’ i ‘yn’ jest niższy od ‘4,11’]

(8) 

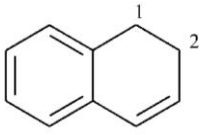
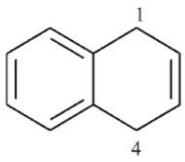
1,13(1),3(1,2),6,10(1,4)-pentabenzenatridekafano-4,8-dien-11-yn (PIN)
jest starszy od



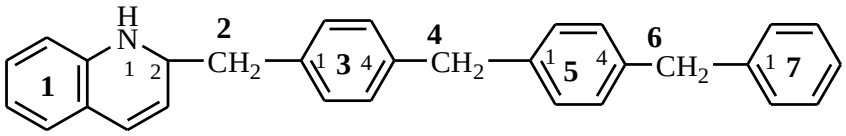
1,13(1),3(1,2),6,10(1,4)-pentabenzenatridekafano-3,11-dien-8-yn (PIN)
[zestaw lokantów’4,8’ końcówek ‘en’ jest niższy od ‘4,11’]

P-44.4.1.10.2 Przedrostkom hydro/dehydro przydziela się niższe lokanty tak jak opisano w P-31.2.

Przykłady (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):

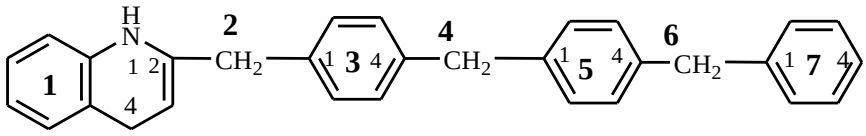
(1)  > 

1,2-dihydronaftalen (PIN) 1,4-dihydronaftalen (PIN
[zestaw lokantów dla przedrostków ‘hydro’ ‘1,2’ jest niższy od ‘1,4’]

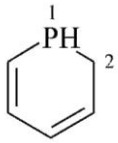
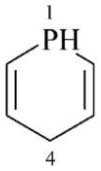
(2) 

$1^1,1^2$-dihydro-1(2)-chinolina-3,5(1,4),7(1)-tribenzenaheptafan (PIN)

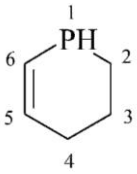
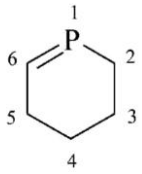
jest starszy od



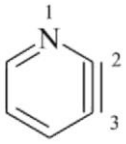
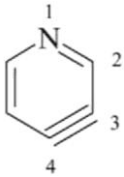
'$1^1,1^4$- dihydro-1(2)-chinolina-3,5(1,4),7(1)-tribenzenaheptafan (PIN)
[zestaw lokantów '$1^1,1^2$' dla przedrostków 'hydro' jest niższy od '$1^1,1^4$']

(3)  > 

1,2-dihydrofosfinin (PIN) 1,4-dihydrofosfinin (PIN)
[zestaw lokantów '1,2' dla przedrostków 'hydro' jest niższy od '1,4']

(4)  > 

1,2,3,4-tetrahydrofosfinin (PIN) 2,3,4,5-tetrahydrofosfinin (PIN)
[zestaw lokantów '1,2,3,4' dla przedrostków 'hydro' jest niższy do '2,3,4,5']

(5)  > 

2,3-didehydropirydyna (PIN) 3,4-didehydropirydyna (PIN)
[zestaw lokantów '2,3' dla przedrostków 'dehydro' jest niższy od '3,4']

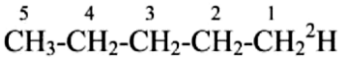
Kryteria wyboru preferowanej nazwy IUPAC opierającej się na starszej strukturze macierzystej, jak opisano w P-44, znajdują się w P-45.

P-44.4.1.11 Starszy pierścień, układ pierścieni lub łańcuch główny ma jeden lub więcej modyfikowanych izotopowo atomów [kryterium (k) w P-44.4.1].

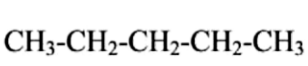
Kiedy dokonuje się wyboru starszej struktury macierzystej pomiędzy izotopowo modyfikowanymi i izotopowo niemodyfikownymi związkami albo pomiędzy izotopowo modyfikowanymi związkami (patrz Rozdział P-8), starszą strukturę macierzystą wybiera się zgodnie z następującymi kryteriami, stosowanymi kolejno aż do rozstrzygnięcia. W strukturach i nazwach, symbole nuklidów ujęte w okrągłych nawiasach opisują podstawienie izotopowe, symbole nuklidów ujęte w kwadratowych nawiasach opisują izotopowe znakowanie (patrz Rozdział P-8).

P-44.4.1.11.1 Starsza struktura macierzysta zawiera większą liczbę izotopowo modyfikowanych atomów lub grup.

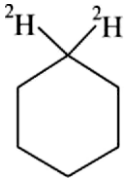
Przykłady (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):



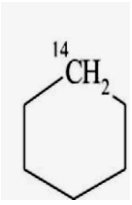
>



(1-$^{2}H_1$)pentan (PIN) pentan (PIN)



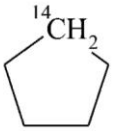
>



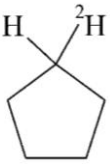
($^{2}H_2$)cykloheksan (PIN) ($^{14}C_1$)cykloheksan (PIN)

P-44.4.1.11.2 Starsza struktura macierzysta ma większą liczbę nuklidów o wyższej liczbie atomowej w modyfikowanych atomach i grupach.

Przykłady (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):

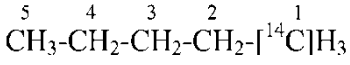


>

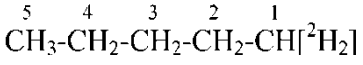


($^{14}C_1$)cyklopentan (PIN) ($^{2}H_1$)cyklopentan (PIN)

[^{14}C jest starsze od ^{2}H]



>

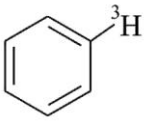


[1-^{14}C]pentan (PIN) [[1,1-^{2}H]pentan (PIN)

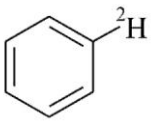
[^{14}C jest starsze od ^{2}H]

P-44.4.1.11.3 Starsza struktura macierzysta ma większą liczbę nukidów o wyższej liczbie masowej w modyfikowanych atomach i grupach.

Przykłady (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):



>



($^3H_1$)benzen (PIN) ($^2H_1$)benzen (PIN)

[^{3}H jest starsze od ^{2}H]

[^{81}Br]^{1}CH$_2$-^{2}CH$_2$-^{3}CH$_2$-^{4}CH$_2$-^{5}CH$_3$ > [^{79}Br]^{1}CH$_2$-^{2}CH$_2$-^{3}CH$_2$-^{4}CH$_2$-^{5}CH$_3$

1-[^{81}Br]bromopentan (PIN) 1-[^{79}Br]bromopentan (PIN)

[^{81}Br jest starsze od ^{79}Br]

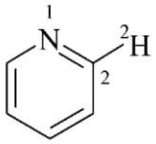
P-44.4.1.11.4 Starsza struktura macierzysta ma najniższy lokant(y) dla izotopowo modyfikowanych atomów i grup.

Przykłady (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):

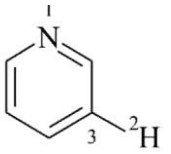
HOOC-^{1}CH$_2$-^{2}CH$_2$-^{3}CH$_2$-^{4}CH[^{2}H]-^{5}CH$_3$ > HOOC-^{1}CH$_2$-^{2}CH$_2$-^{3}CH$_2$-^{4}CH$_2$-^{5}CH$_2$[^{2}H]

kwas [4-$^2H_1$]pentanowy (PIN) kwas [5-$^2H_1$]pentanowy (PIN)

[4-^{2}H jest starsze od 5-^{2}H]



>



(2-^{2}H)pirydyna (PIN) (3-^{2}H)pirydyna (PIN)

[2-^{2}H jest starsze od 3-^{2}H]

P-44.4.1.11.5 Starsza struktura macierzysta, dla modyfikowanych atomów i grup, ma niższy lokant(y) nuklidów o wyższej liczbie atomowej.

Przykład (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):

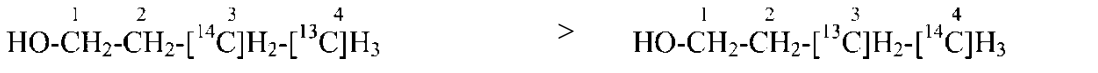
HOOC-^{1}CH$_2$-^{2}CH$_2$-^{3}[^{13}C]H$_2$-^{4}CH$_2$-^{5}CH$_2$[^{2}H] > HOOC-^{1}CH$_2$-^{2}CH$_2$-^{3}CH$_2$-^{4}CH[^{2}H]-^{5}[^{13}C]H$_3$

kwas [4-^{13}C,5-$^2H_1$]pentanowy (PIN) kwas [5-^{13}C,4-$^2H_1$]pentanowy (PIN)

[4-^{13}C jest starsze od 5-^{13}C]

P-44.4.1.11.6 Starsza struktura macierzysta, dla modyfikowanych atomów i grup, ma niższy lokant(y) nuklidów o wyższej liczbie masowej.

Przykład (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):



[4-^{13}C,3-^{14}C]butan-1-ol (PIN) > [3-^{13}C,4-^{14}C]butan-1-ol (PIN)

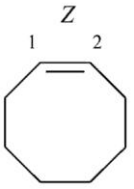
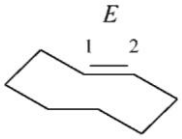
[3-^{14}C jest starsze od 4-^{14}C]

P-44.4.1.12 Starszy pierścień, układ pierścieni lub łańcuch główny ma jedno lub więcej centrów stereogenicznych [kryterium (l) w P-44.4.1.

P-44.4.1.12.1 Izomeria *cis/trans,* konwencja *E/Z*

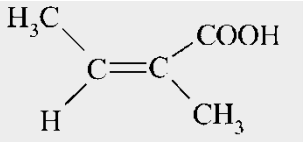
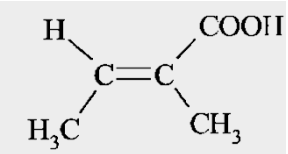
Kiedy jest wybór pomiędzy macierzystymi strukturami, które różnią się tylko konfiguracją ‘*Z*’ i ‘*E*’, starsza struktura macierzysta zawiera większą liczbę podwójnych wiązań o konfiguracji‘*Z*’; jeśli nadal konieczny jest wybór, starsza struktura macierzysta ma najniższy zestaw lokantów podwójnych wiązań o konfiguracji ‘*Z*’. Znaczenie stereodeskryptorów „*Z*’ i ‘*E*’ jest podane w Rozdziale P-9.

Przykład (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):

(1)  > 

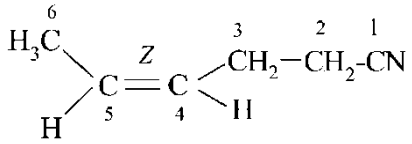
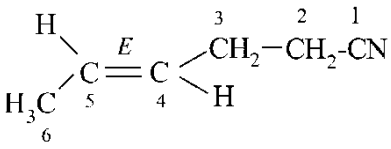
(*Z*)-cyklooktan (PIN) (*E*)-cyklooktan (PIN)
cis-cyklooktan *trans*-cyklooktan

[‘*Z*’ jest starsze od ‘*E*’]

(2)  > 

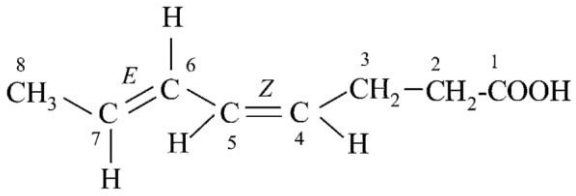
kwas (2*Z*)-but-2-enowy (PIN) kwas (2*E*)-but-2-enowy (PIN)

[‘*Z*’ jest starsze od ‘*E*’]

(3)  > 

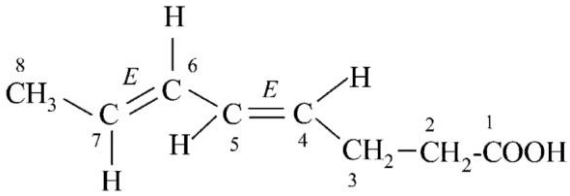
(4*Z*)-heks-4-enonitryl (PIN) (4*E*)-heks-4-enonitryl (PIN)

[‘*Z*’ jest starsze od ‘*E*’]

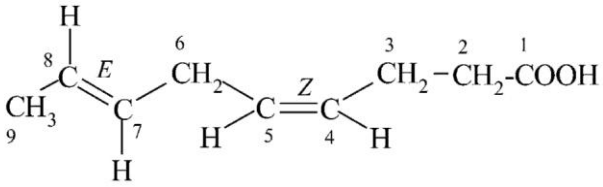
(4) 

kwas (4*Z*,6*E*)-okta-4,6-dienowy (PIN)

jest starsze od

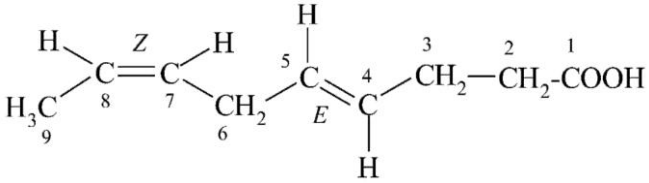


kwas (4*E*,6*E*)-okta-4,6-dienowy (PIN)
[‘*Z*,E’ jest starsze od *‘E,E*’}

(5) 

kwas (4*Z*,7*E*)-nona-4,7-dienowy (PIN)

jest starszy od

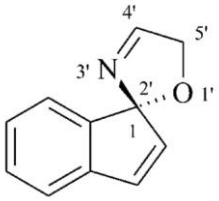


kwas (4*E*,7*E*)-nona-4,7-dienowy (PIN)
[‘4*Z*,7*E*’ jest starsze od ‘4*E*,7*Z*’]

P-44.4.1.12.2 Enancjomeria, stereodeskryptory ‘*R*’ i ‘*S*’

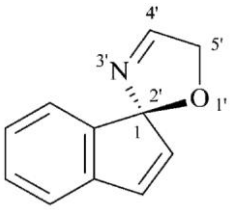
Kiedy jest wybór pomiędzy strukturami macierzystymi, różniących się tylko konfiguracją centrów chiralności, główny łańcuch lub starszy układ pierścieni wybiera się stosując reguły sekwencji CIP **4** i **5,** w porządku: *like* stereodeskryptory ***RR, SS*** mają pierwszeństwo przed *unlike* ‘*RS*’ i ‘*SR*’ (‘*l*’ ma pierwszeństwo przed ‘*u*’), ‘*r*’ przed ‘*s*’ następnie ‘*R*’ przed ‘*S*’. Reguły sekwencji CIP opisane są w Rozdziale P-9.

Przykład (symbol > oznacza ‘jest starszy od’):

(1) 

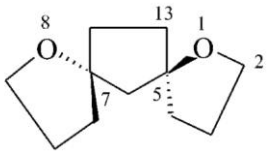
(1*R*)-5′*H*-spiro[inden-1,2′-(1,3)oksazol] (PIN)

jest starszy od



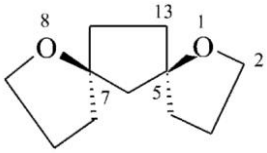
(1*S*)-5′*H*-spiro[inden-1,2′-(1,3)oksazol] (PIN)

[‘*R*’ jest starszy od ‘*S*’]

(2) 

(5*R*,7*R*)-1,8-dioksadispiro[4.1.4^{7},2^{5}]tridekan (PIN)

jest starszy od



(5*R*,7*S*,)-1,8-dioksadispiro[4.1.4^{7},2^{5}]tridekan (PIN)
[‘*R*,*R*’ jest starsze od ‘*R*,’]

P-45 WYBÓR PREFEROWANEJ NAZWY IUPAC

P-45.0 WPROWADZENIE

Na podstawie tej samej struktury macierzystej wybranej według P-44 można utworzyć dwie lub więcej nazw w wyniku różnego wzoru podstawienia lub wielokrotnego pojawiania się tej samej starszej struktury macierzystej. Struktura macierzysta jest definiowana (P-15.1) jako macierzysty wodorek, na przykład, benzen, jako sfunkcjonalizowany wodorek macierzysty, na przykład, cykloheksanol albo jakiś funkcyjny związek macierzysty, na przykład, kwas octowy. Zastosowanie kryteriów opisanych w tym Rozdziale prowadzi do preferowanej nazwy IUPAC.

P-45.1 Multiplikowanie identycznych starszych struktur macierzystych
P-45.2 Kryteria odnoszące się do liczby i ulokowania podstawników
P-45.3 Kryteria odnoszące się wyłącznie do niestandardowej wiązalności
P-45.4 Kryteria odnoszące się wyłącznie do modyfikacji izotopowej
P-45.5 Kryteria odnoszące się do alfanumerycznego porządku nazw
P-45.6 Kryteria odnoszące się wyłącznie do konfiguracji

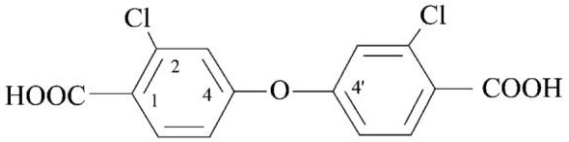
P-45.1 MULTIPLIKOWANIE STRUKTUR MACIERZYSTYCH O IDENTYCZNYM STARSZEŃSTWIE

P-45.1.1 Przy tworzeniu preferowanych nazw IUPAC nomenklatura multiplikacyjna ma pierwszeństwo przed nomenklaturą podstawnikową do wyrażenia wielokrotnego pojawiania się identycznych starszych struktur macierzystych, innych niż alkany, w nazwie struktury macierzystej (patrz P-51.3.1). W większości przypadków nazwy multiplikacyjne są krótsze od prawidłowych nazw podstawnikowych. Preferowaną nazwę IUPAC tworzy się w nomenklaturze multiplikacyjnej przy zachowaniu następujących kryteriów (patrz P_51.2.3).

(1) wiązania łączące (pojedyncze lub wielokrotne) pomiędzy centralnym podstawnikiem grupy multiplikacyjnej i wszystkimi kolejnymi jednostkami strukturalnymi są identyczne; i
(2) grupy multiplikacyjne, inne niż centralna grupa multiplikacyjna, są podstawione symetrycznie; i
(3) lokanty wszystkich podstawników na identycznych macierzystych strukturach, włączając grupy wyrażone przyrostkami, są identyczne .

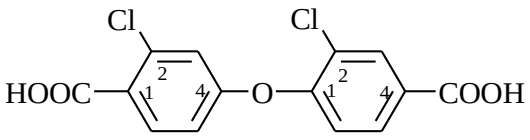
Jeśli te warunki nie są spełnione do tworzenia preferowanych nazw IUPAC, stosuje się nomenklaturę podstawnikową.

Przykład:



4,4′-oksobis(kwas 2-chlorobenzoesowy) (PIN, nazwa multiplikacyjna)

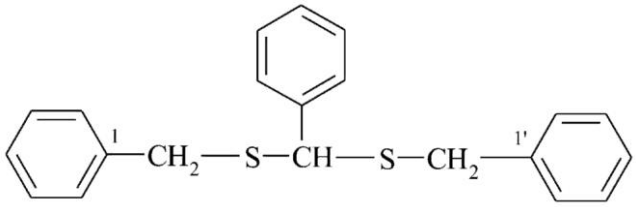
ale



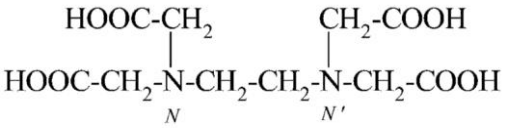
kwas 4-(4-karboksy-2-chlorofenoksy)-2-chlorobenzoesowy (PIN, nazwa podstawnikowa)

P-45.1.2 Kiedy dwie lub więcej struktur macierzystych, pierścieni, układów pierścieni lub łańcuchów spełnia wymagania nomenklatury multiplikacyjnej (patrz P-15.3), jako macierzystą strukturę do multiplikowania, wybiera się liczniej występującą strukturę.

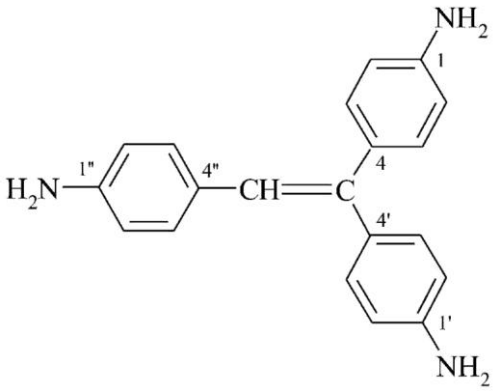
Przykład:



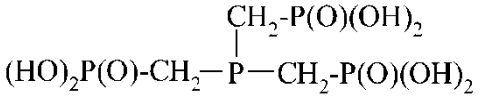
1,1′-[(fenylometyleno)bis(sulfanodiylometyleno)]dibenzen (PIN)
(multiplikowanie trzech pierścieni benzenu nie jest możliwe)



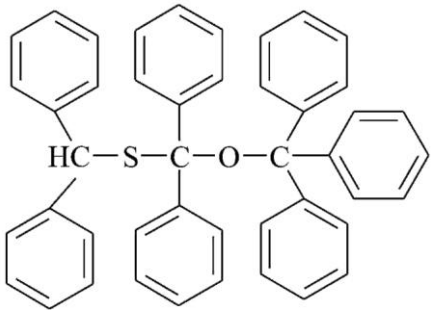
kwas 2,2′,2″,2‴-(etano-1,2-diylodinitrylo)tetraoctowy
N,*N*′-etano-1,2-diylobis[*N*-(karboksymetylo)glicyna]



4,4′,4″-(eteno-1,1,2-triylo)trianilina (PIN)
[nie 4,4′-[2-(4-aminofenylo)eteno-1,1-diylo)dianilina; PIN multiplikuje trzy macierzyste struktury; druga nazwa multiplikuje tylko dwie]



kwas [fosfanotriylotris(metyleno)]tris(fosfonowy) (PIN)



1,1′,1″-[{ [(difenylometylo)sulfanylo](difenylo)metoksy}metanotriylo)tribenzen (PIN)
(nie 1,1′-({[difenylo(trifenylometoksy)metylo]sulfanylo}metylene)dibenzen;
nazwa PIN zwielokrotnia trzy struktury macierzyste, druga nazwa tylko dwie)

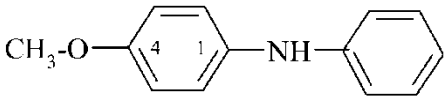
P-45.2 KRYTERIA ZWIĄZANE Z LICZBĄ I POZYCJĄ PODSTAWNIKÓW

Poniższe kryteria stosuje się kolejno aż do podjęcia decyzji. Preferowana nazwa IUPAC jest nazwą starszej struktury macierzystej, mającej:

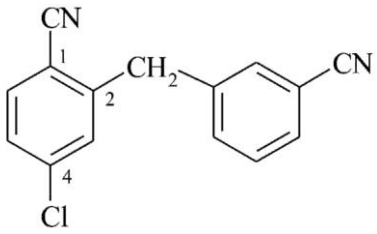
P-45.2.1	maksymalną liczbę podstawników wymienianych jako przedrostki;
P-45.2.2	najniższy zestaw lokantów podstawników wymienianych jako przedrostki;
P-45.2.3	najniższy zestaw lokantów podstawników w kolejności wymieniania w nazwie

P-45.2.1 Preferowana nazwa IUPAC jest nazwą struktury mającej maksymalną liczbę podstawników wymienianych jako przedrostki (innych niż 'hydro/dehydro') nazwy struktury macierzystej.

Przykłady:

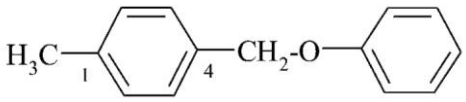
(1) 

4-metoksy-*N*-fenyloanilina (PIN)
[nie *N*-(4-metoksyfenylo]anilina; w PIN struktura macierzysta ma więcej podstawników, dwa proste podstawniki vs. jeden zespolony podstawnik]

(2) 

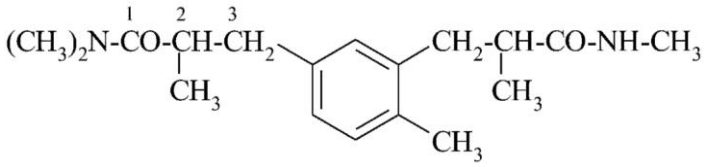
4-chloro-2-[(3-cyjanofenylo)metylo]benzonitryl (PIN)

[nie 3-[(5-chloro-5-cyjanofenylo)metylo]benzonitryl; struktura macierzysta PIN ma więcej podstawników, dwa (jeden prosty i jeden zespolony) vs. jeden kompleksowy podstawnik]

(3) 

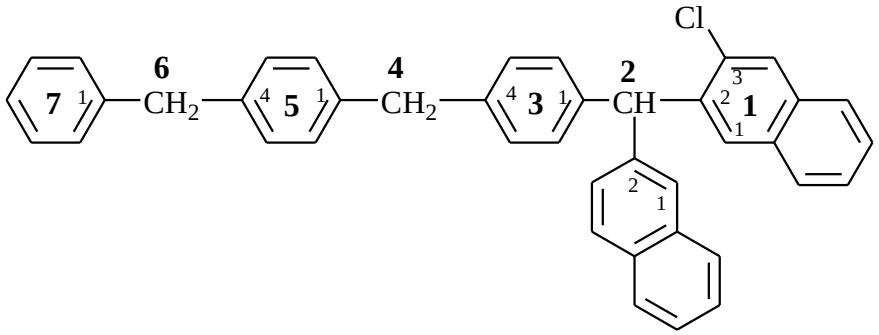
1-metylo-4-(fenoksymetylo)benzen (PIN)

[nie [(4-metylofenylo)metoksy]benzen; struktura macierzysta PIN ma więcej podstawników, dwa (jeden prosty i jeden zespolony) vs. jeden kompleksowy podstawnik]

(4) 

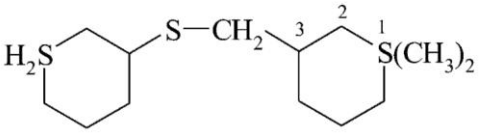
N,*N*,2-trimetylo-3-{4-metylo-3-[2-metylo-3-metyloamino)-3-oksopropylo]fenylo}propanoamid (PIN)

[nie 3-{5-[(3-dimetyloamino)-2-metylo-3-oksopropylo]-2-metylofenylo}-*N*,2-dimetylopropanoamid; nazwa PIN ma więcej podstawników, cztery (trzy proste i jeden kompleksowy) vs.trzy (dwa proste i jeden kompleksowy]

(5) 

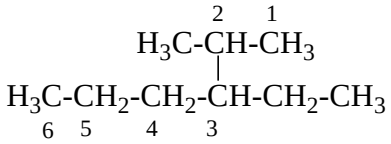
2-(naftaleno-2-ylo)-1^3-chloro-1(2-naftalena-3,5(1,4),7(1)-tribenzenaheptafan (PIN)

[nie 2-(3-chloronaftalen-2-yl)-1(2)-naftalena-3,5(1,4),7(1)-tribenzenaheptafan; struktura macierzysta PIN ma więcej podstawników, dwa proste podstawniki vs. jeden prosty].

(6) 

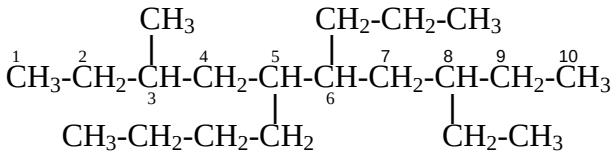
1,1-dimetylo-3-{[(1λ^4-tian-3-ylo)sulfanylo]metylo}-1λ^4-tian (PIN)
[nie 3-{[(1,1-dimetylo-1λ^4-tian-3-ylo)metylo]sulfanylo- 1λ^4-tian; struktura macierzysta PIN ma więcej podstawników, dwa proste podstawniki vs. jeden kompleksowy].

(7)



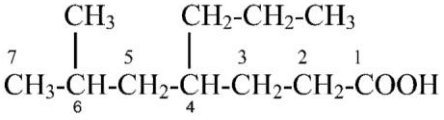
3-etylo-2-metyloheksan (PIN)
[nie 3-izopropyloheksan ani 3-(propan-2-ylo)heksan; struktura macierzysta PIN ma więcej podstawników, dwa proste podstawniki vs. jeden kompleksowy].

(8)



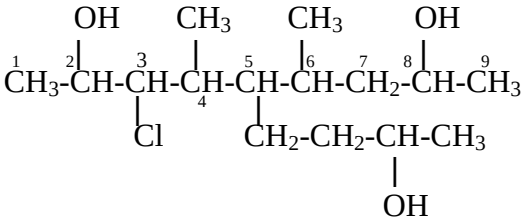
5-butylo-8-etylo-3-metylo-5-propylodekan (PIN)
[nie 3-etylo-6-(2-metylobutylo)-5-propylodekan; struktura macierzysta PIN ma więcej podstawników, cztery proste podstawniki vs. trzy, dwa proste i jeden zespolony].

(9)

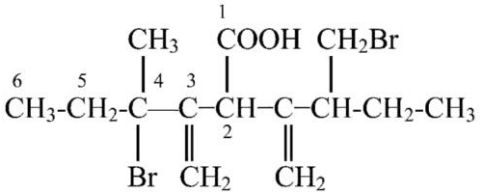


kwas 6-metylo-4-propyloheptanowy (PIN)
[nie kwas 4-(2-metylopropylo)heptanowy; główny łancuch ma więcej podstawników, dwa proste podstawniki vs. jeden zespolony].

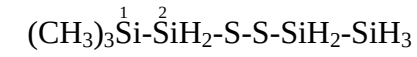
(10)



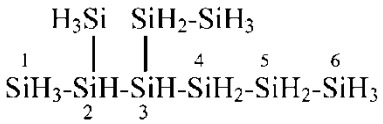
3-chloro-5(3-hydroksybutylo)-4,6-dimetylononano-2,8-diol (PIN)
[nie 3-chloro-5-(4-hydroksypentan-2-ylo)-4-metylononano-2,8-diol; macierzysty łańcuch PIN ma więcej podstawników; cztery (trzy proste i jeden zespolony) vs. trzy (dwa proste i jeden zespolony)

(11) 

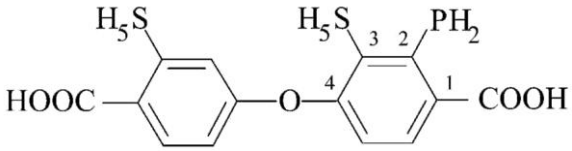
kwas 4-bromo-2-[3-(bromometylo)pent-1-en-2-ylo]-4-metylo-3-metylidenoheksanowy (PIN)
[nie kwas 4-(bromometylo)-2-(3-bromo-3-metylopent-1-en-2-ylo)-3-metylidenokeksanowy; macierzysty łańcuch PIN ma więcej podstawników; cztery (trzy proste i jeden zespolony) vs. trzy (jeden prosty i dwa zespolone)
kwas 4-bromo-2-[2-bromometylo)-1-metylidenobutylo)-4-metylo-3-metylidenoheksanowy

(12) 

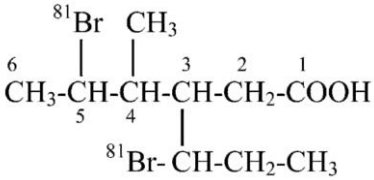
2-(disilanylodisulfanylo)-1,1,1-trimetylodisilan (PIN)
[nie [1-[2-(2-trimetylodisilanylo)disulfan-1-ylo]disilan; struktura macierzysta PIN ma więcej podstawników, cztery (trzy proste i jeden zespolony) vs. jeden kompleksowy podstawnik]

(13) 

3-disilanylo-2-sililoheksasilan (nazwa wstępnie wybrana, patrz P-12.2)
[nie 3-(trisilan-2-ylo)heksasilan ani 3-(sililodisilanylo)heksasilan; łańcuch macierzysty PIN ma więcej podstawników, dwa proste podstawniki vs. jeden prosty]

(14) 

kwas 4-[4-karboksy-3-(λ^6-sulfanylo)fenoksy]-2-fosfanylo-3-(λ^6-sulfanylo)benzoesowy (PIN)
[nie 4-(4-karboksy-3-fosfanylo-2-(λ^6-sulfanylo)fenoksy-2-(λ^6-sulfanylo)benzoesowy; struktura macierzysta PIN ma więcej podstawników, trzy (dwa proste i jeden zespolony vs. dwa (jeden prosty i jeden kompleksowy)]

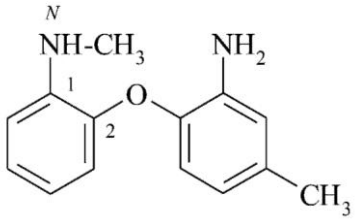
(15) 

kwas 5-(^{81}Br)bromo-3-[1-(^{81}Br)bromopropylo]-4-metyloheksanowy (PIN)
[nie kwas 4-(^{81}Br)bromo-3-[3-(^{81}Br)bromobutan-2-ylo]heksanowy; macierzysty łańcuch ma więcej podstawników, trzy (dwa proste i jeden zespolony) vs. dwa (jeden prosty i jeden zespolony)

P-45.2.2 Preferowana nazwa IUPAC opiera się na starszej strukturze macierzystej, mającej niższy lokant lub zestaw lokantów wskazywanych przedrostkami (innymi niż ‘hydro/dehydro’) podstawników struktury macierzystej.

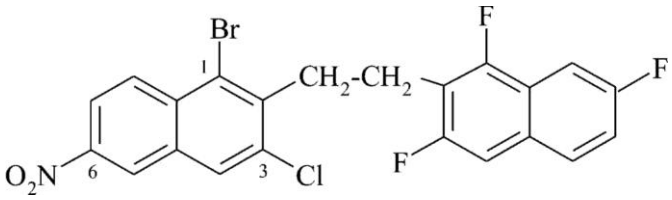
Przykłady:

(1)



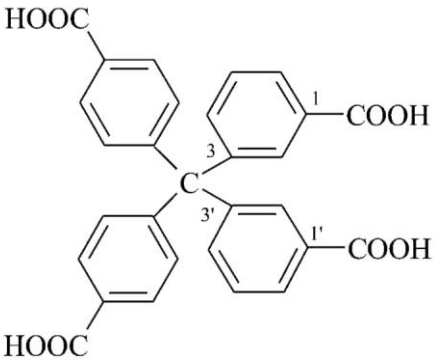
2-(2-amino-4-metylofenoksy)-*N*-metyloanilina (PIN)
[nie 5-metylo-[2-(metyloamino)fenoksy]anilina; zestaw lokantów ‘*N*,2’ w PIN jest niższy od ‘2,5’]

(2)



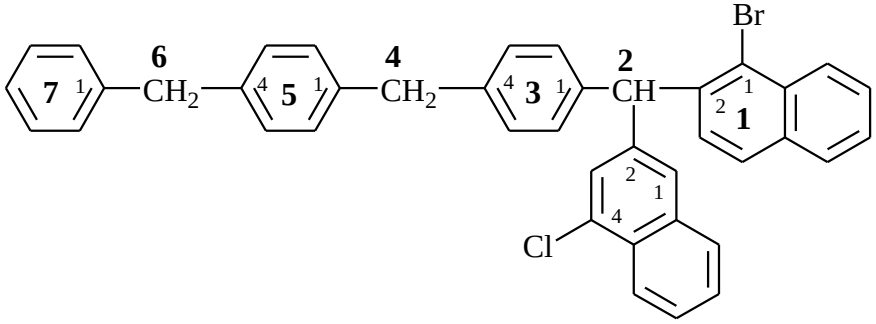
1-bromo-3-chloro-6-nitro-2-[2-2-(1,3,7-trifluoronaftalen-2-ylo)etylo]naftalen (PIN)
nie 2-[2-(1-bromo-3-chloro-6-nitronaftalen-2-ylo)etylo-1,3,7-trifluoronaftalen; zestaw lokantów ‘1,2,3,6’ w PIN jest niższy od ‘1,2,3,7’]

(3)



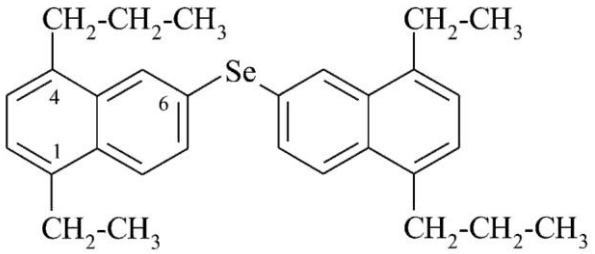
kwas 3,3′-[bis(4-karboksyfenylo)metyleno]dibenzoesowy (PIN)
[nie kwas 4,4'-[bis(3-karboksyfenylo)metyleno]dibenzoesowy; zestaw lokantów ‘3,3′’ w PIN jest niższy od ‘4,4′’]

(4)



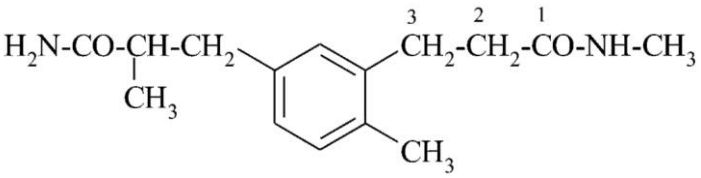
1^1-bromo-2-(4-chloronaftalen-2-ylo-1(2)naftalena-3,5(1,4),7(1)tribenzenaheptafan (PIN)
[nie 2-(1-bromonaftalen-2-ylo)-1^4-chloro-1(2)naftalena-3,5(1,4),7(1)tribenzenaheptafan; zestaw lokantów w PIN '1^1,2' jest niższy od zestawu lokantów '1^4,2']

(5)



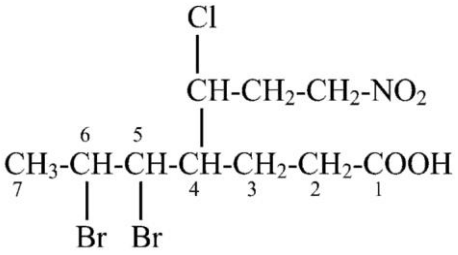
1-etylo-6-(8-etylo-5-propylonaftalen-2-ylo)selanylo-4-propylonaftalen (PIN)
[nie 1-etylo-7-[5-etylo-8-propylonaftalen-2-ylo)selanylo]4-propylonaftalen; zestaw lokantów w PIN '1,4,6' jest niższy od ''1,4,7'

(6)



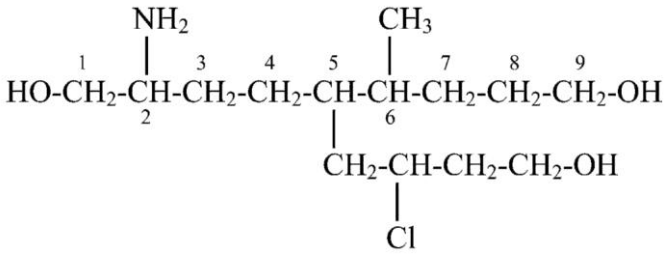
3-[5-(3-amino-2-metylo-3-oksopropylo)-2-metylofenylo]-*N*-metylopropanoamid (PIN)
[nie 2-metylo-3-[4-metylo-3-(metyloamino)-3-oksopropylo]propanoamid; zestaw lokantów PIN '*N*,3' jest niższy od ''2,3']

(7)



kwas 5,6-dibromo-4-(1-chloro-3-nitropropylo)heptanowy (PIN)
[nie kwas 5-chloro-4-(1,2-dibromopropylo)-7-nitroheptanowy; zestaw lokantów w PIN '4,5,6' jest niższy od '4,5,7']

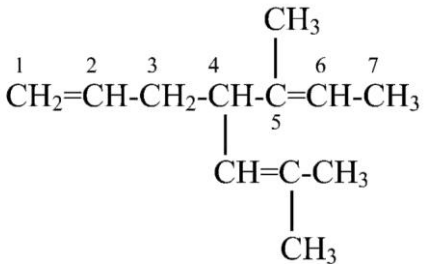
(8)



2-amino-5-(2-chloro-4-hydroksybutylo)-6-metylononano-1,9-diol (PIN)
[nie 2-amino-7-chloro-5-(5-hydroksypentan-2-ylo)nonano-1,9-diol ani

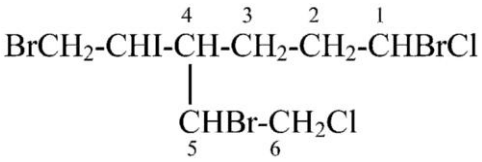
5-(3-amino-4-hydroksybutylo)-3-chloro-6-metylononano-1,9-diol;
zestaw lokantów ‘2,5,6’ w PIN jest niższy od ‘2,5,7’ i ‘3,5,6’]

(9)



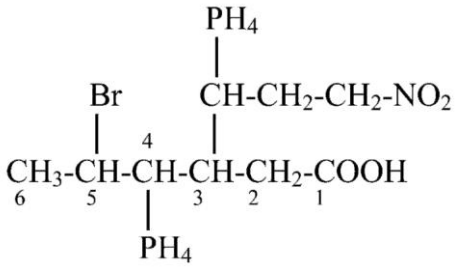
5-metylo-4-(2-metyloprop-1-en-1-ylo)hepta-1,5-dien (PIN)
[nie 4-(buten-2-ylo)-6-metylohepta-1,5-dien (w PIN zestaw lokantów ‘4,5’ jest niższy od ‘4,6’]

(10)



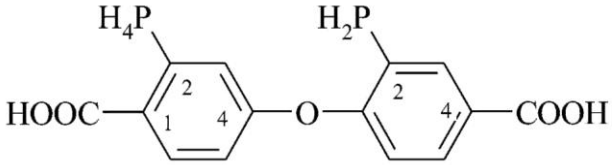
1,5-dibromo-4-(2-bromo-1-jodoetylo)-1,6-dichloroheksan (PIN)
[nie 1,6-dibromo-3-(1-bromo-2-chloroetylo)-6-chloro-2-jodoheksan; zestaw lokantów PIN ‘1,1,4,5,6’ jest niższy od ‘1,2,3,6,6’]

(11)



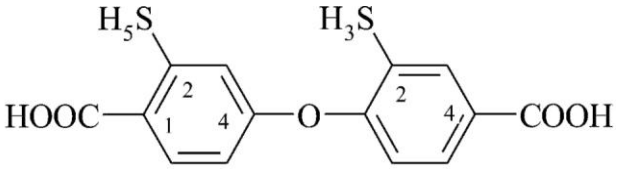
kwas 5-bromo-3-[3-nitro-1-(λ^5-fosfanylo)propylo]-4-(λ^5-fosfanylo)heksanowy (PIN)
[nie kwas 3-[2-bromo-1-(λ^5-fosfanylo)propylo]-6-nitro-4-(λ^5-fosfanylo)heksanowy; zestaw lokantów PIN ‘3,4,5’ jest niższy od ‘3,4,6’]

(12)



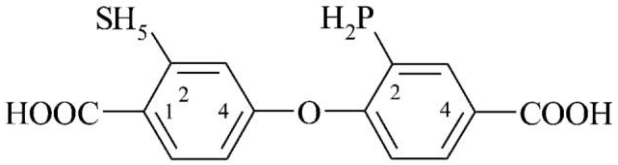
kwas 4-(4-karboksy-2-fosfanylofenoksy)-2-(λ^5-fosfanylo)benzoesowy (PIN)
[nie 4-[4-karboksy-3-(λ^5-fosfanylo)fenoksy]-3-3-fosfanylobenzoesowy; zestaw lokantów w PIN ‘2,4’ jest niższy od ‘3,4’]

(13)



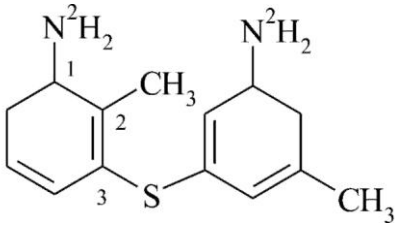
kwas 4-[4-karboksy-2-(λ^4-sulfanylo)fenoksy]2-(λ^6-sulfanylo)benzoesowy (PIN)
[nie kwas 4-[4-karboksy-3-(λ^6-sulfanylo)fenoksy]3-(λ^4-sulfanylo)benzoesowy; zestaw lokantów w PIN '2,4' jest niższy od '3,4']

(14)



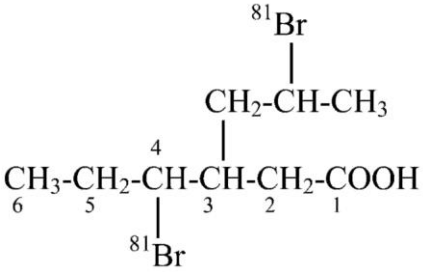
kwas 4-(4-karboksy-2-fosfanylofenoksy)-2-(λ^6-sulfanylo)benzoesowy (PIN)
[nie [4-[4-karboksy-3-(λ^6-sulfanylo)fenoksy]-3-fosfanylobenzoesowy; zestaw lokantów w PIN '2,4' jest nizszy od '3,4']

(15)



3-{[3-($^2H_2$)amino-5-metylocykloheksa-1,5-dien-1-ylo]sulfanylo-2-metylocykloheksa-2,4-dieno-1-($^2H_2$)amina (PIN)
[nie 3-{[3-($^2H_2$)amino-2-metylocykloheksa-1,5-dien-1-ylo]sulfanylo}-5-metylocykloheksa-2,4-dieno-1-($^2H_2$)amina; zestaw lokantów w PIN '2,3' jest niższy od '3,5'

(16)

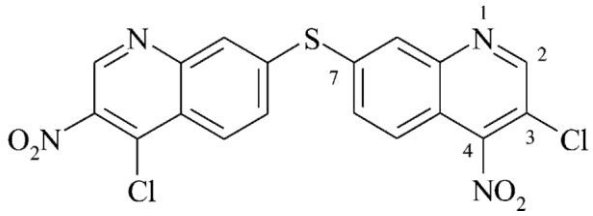


kwas 4-(^{81}Br)bromo-3-[2-(^{81}Br)bromopropylo]heksanowy (PIN)
[nie kwas 5-(^{81}Br)bromo-3-[1-(^{81}Br)bromopropylo]heksanowy; zestaw lokantów w PIN '3,4' jest niższy od '3,5']

P-45.2.3 Preferowana nazwa IUPAC opiera sie na starszej strukturze macierzystej mającej w kolejności wymieniania w nazwie niższy lokant lub zestaw lokantów dla podstawników struktury macierzystej wskazywanych przedrostkami (innymi niż 'hydro/ dehydro').

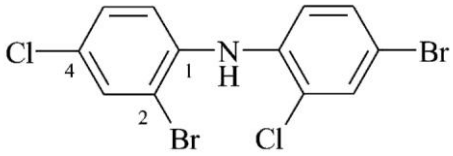
Przykłady:

(1)



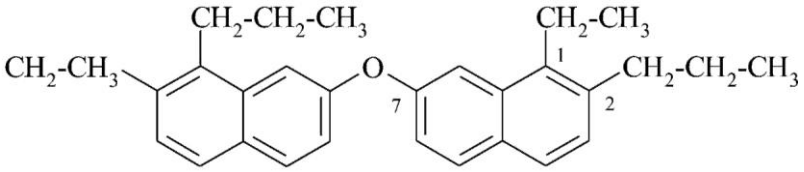
3-chloro-7-[(4-chloro-3-nitrochinolin-7-ylo)sulfanylo]-4-nitrochinolina (PIN)
[nie 4-chloro-7-[(3-chloro-4-nitrochinolin-7-ylo)sulfanylo]-3-nitrochinolina; w obu nazwach zestawy lokantów są takie same, czyli ‘3,4,7’ ale kolejność ich wymieniania w nazwach ‘3,4,7’ w PIN jest niższa od ‘4,7,3’]

(2)



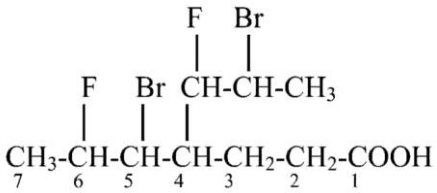
2-bromo-*N*-(4-bromo-2-chlorofenylo)-4-chloroanilina (PIN)
[nie 4-bromo-*N*-(2-bromo-4-chlorofenylo)-2-chloroanilina; zestawy lokantów są takie same, czyli ‘*N*,2,4’, ale kolejność wymieniania w nazwie zestaw ‘2,*N*,4’ w PIN jest niższa od ‘4,*N*,2’]

(3)

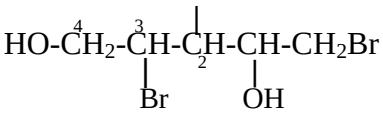


1-etylo-7-[(7-etylo-8-propylonaftalen-2-yl)oksy]-2-propylonaftalen (PIN)
[nie 2-etylo-7-[(7-etylo-8-propylonaftalen-2-yl)oksy]-1-propylonaftalen; w obu nazwach są takie same zestawy lokantów czyli ‘1,2,7’, ale w kolejności wymieniania w nazwie zestaw lokantów w PIN ‘1,7,2’ jest niższy od ‘2,7,1’]

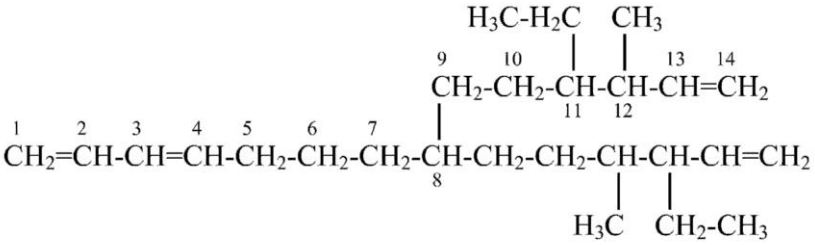
(4)



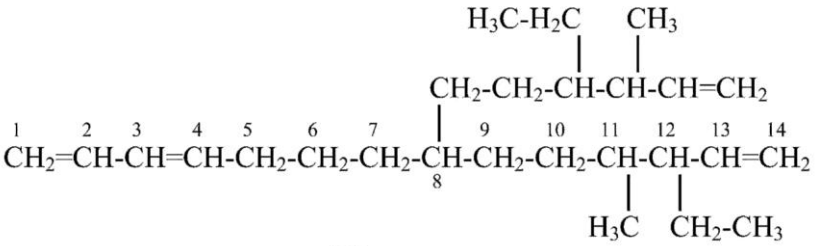
kwas 5-bromo-4-(2-bromo-1-fluoropropylo)-6-fluoroheptanowy (PIN)
[nie kwas 6-bromo-4-(1-bromo-2-fluoropropylo)-5-fluoroheptanowy; zestawy lokantów w obu nazwach są takie same, ‘4,5,6’, ale w kolejności wymieniania w nazwie zestaw lokantów PIN ‘5,4,6’ jest niższy od ‘6,4,5’]

(5) 

kwas 3-bromo-2-(2-bromo-1-hydroksyetylo)-4-hydroksybutanowy (PIN)
[nie kwas 4-bromo-2-(1-bromo-2-hydroksyetylo)-3-hydroksybutanowy; zestawy lokantów w obu nazwach są takie same, ‘2,3,4’, ale w kolejności wymieniania w nazwie zestaw lokantów w PIN, ‘3,2,4’ jest niższy od ‘4,2,3’]

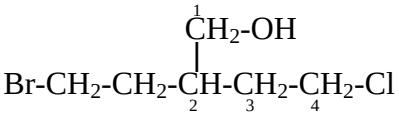
(6) 

(I)

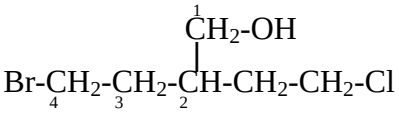


(II)

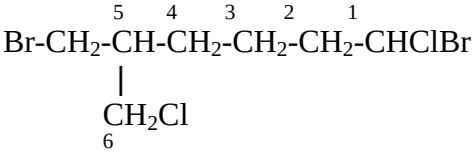
11-etylo-8-(4-etylo-3-metyloheks-5-en-1-ylo)-12-metylotetradeka-1,3,13-trien (**I**) (PIN)
[nie 12-etylo-8-(3-etylo-4-metyloheks-5-en-1-ylo)-11-metylotetradeka-1,3,13-trien (**II**); zestawy lokantów w obu nazwach są takie same, ‘8,11,12’, ale w kolejności wymieniania w nazwie zestaw PIN ‘11,8,12’ jest niższy od ‘12,8,11’].

(7)  2-(2-bromoetylo)-4-chlorobutan-1-ol (PIN)

nie

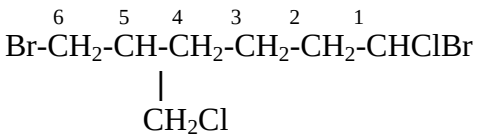
 4-bromo-2-(2-chloroetylo)butan-1-ol

(**Wyjasnienie)** zestaw lokantów w obu nazwach jest taki sam, czyli ‘2,4’ ale kolejność ich występowania, ‘2,4’ w nazwie w PIN jest niższa od ‘4,2’ w drugiej nazwie)

(8) 

1-bromo-5-(bromometylo)-1,6-dichloroheksan (PIN)

nie

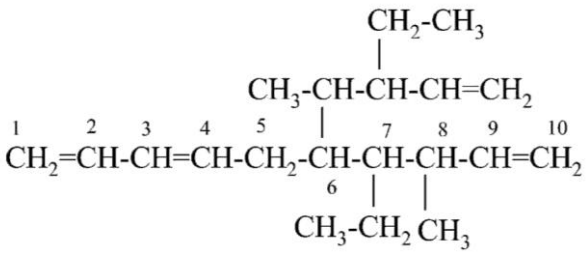


1,6-dibromo-1-chloro-5-(chlorometylo)heksan

Wyjaśnienie: w obu nazwach zestawy lokantów są takie same, ‘1,1,5,6’, ale kolejność ich występowania w nazwie, zestaw lokantów ‘1,5,1,6’ jest niższy niż ‘1,6,1,5’

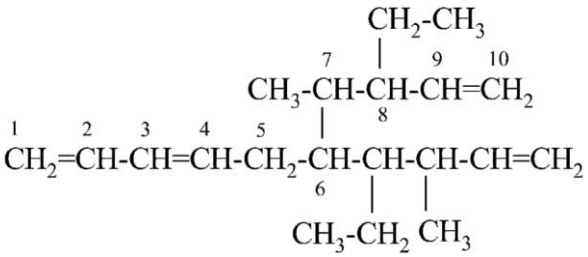
Uwaga: Reguła C-13.11(j) w zaleceniach z 1979 roku (lit. 1) prowadzi do nazwy ‘nie’.

(9)



7-etylo-6-(3-etylopent-4-en-2-ylo)-8-metylodeka-1,3,9-trien (PIN)

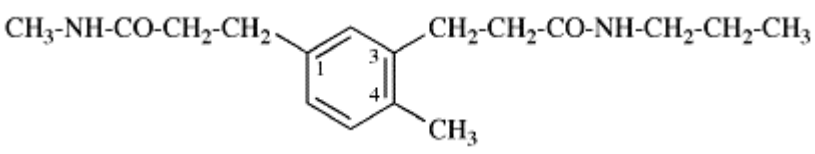
nie



8-etylo-7-metylo-6-(4-metyloheks-5-en-3-ylo)deka-1,3,9-trien

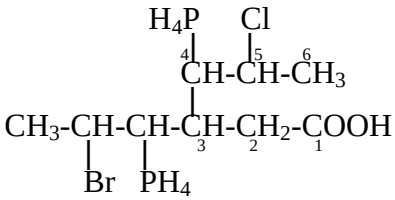
Wyjaśnienie: zestaw lokantów w obu nazwach jest taki sam, czyli ‘6,7,8’ , ale kolejność ich występowania, ‘6,7,8’ w nazwie PIN jest niższa od ‘8,7,6’ w drugiej nazwie

(10)



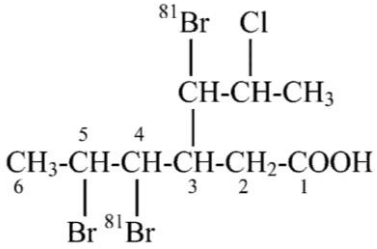
N-metylo-3-{4-metylo-3-[3-okso-3-(propyloamino)propylo]fenylo}propanoamid (PIN)
[nie 3-{2-metylo-5-[3-(metyloamino)-3-oksopropylo]fenylo}-*N*-propylopropanoamid;
(zestaw lokantów w obu nazwach jest taki sam, czyli '*N*,3' , ale kolejność ich występowania, '*N*,3' w nazwie PIN jest niższa od '3,*N*' w drugiej nazwie)

(11)



kwas 3-[2-bromo-1-(λ^5-fosfanylo)propylo]-5-chloro-4-(λ^5-fosfanylo)heksanowy (PIN)
[nie 5-bromo-3-[2-chloro-1-(λ^5-fosfanylo)propylo]-4-(λ^5-fosfanylo)heksanowy;
zestaw lokantów w obu nazwach jest taki sam, '3,4,5', ale kolejność ich występowania w nazwie PIN, '3,5,4' jest niższa od '5,3,4' w drugiej nazwie]

(12)



kwas 4-(^{81}Br)bromo-3-[1-(^{81}Br)bromo-2-bromopropylo]-5-chloroheksanowy (PIN)
[nie 4-(^{81}Br)bromo-5-bromo-3-[1-(^{81}Br)bromo-2-chloropropylo]heksanowy;
zestawy lokantów w obu nazwach sa takie same, '3,4,5', ale kolejność ich występowania w nazwie PIN '4,3,5' jest niższa od '4,5,3']

P-45.3 KRYTERIA ODNOSZĄCE SIĘ TYLKO DO PODSTAWNIKÓW O NIESTANDARDOWEJ WIĄZALNOŚCI, PRZY RÓWNOCENNOŚCI INNYCH KRYTERIÓW

Podane niżej kryteria odnoszą się tylko do podstawników o niestandardowej wiązalności i stosuje się je kolejno, aż do osiągnięcia decyzji, przy spełnieniu wcześniejszych kryteriów.

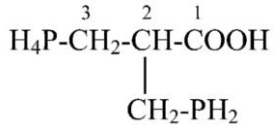
P-45.3.1 maksymalna liczba wymienianych jako przedrostki podstawników o niestandardowej wiązalności;

P-45.3.2 niższy zestaw lokantów wymienianych jako przedrostki podstawników o wyższej wiązalności;

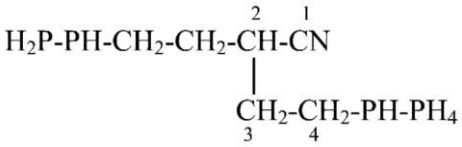
P-45.3.1 Preferowana nazwa IUPAC opiera się na starszej strukturze macierzystej mającej najwięcej wymienianych jako przedrostki podstawników o wyższej wiązalności.

Przykłady

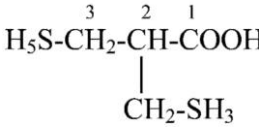
kwas 3-(λ^5-fosfanylo)-2-(fosfanylometylo)propanowy (PIN)



[nie kwas 3-fosfanylo-2-(λ^5-fosfanylometylo)propanowy; w strukturze macierzystej PIN w przedrostku występuje podstawnik o wyższej wiązalności, ‘ $\lambda^5 > \lambda^3$’]



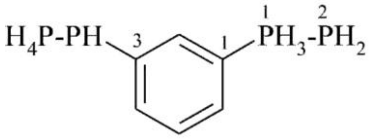
4-(2λ^5-difosfan-1-ylo)-2-[2-(difosfan-1-ylo)etylo]butanonitryl (PIN)
[nie 4-(difosfan-1-ylo)-2-[2-(2λ^5-difosfan-1-ylo)etylo]butanonitryl; w strukturze macierzystej PIN w przedrostku występuje podstawnik o wyższej wiązalności, ‘$\lambda^5 > \lambda^3$’]



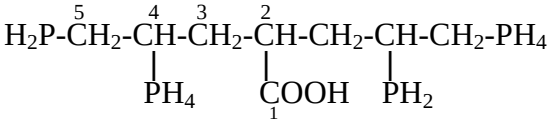
kwas 3-(λ^6-sulfanylo)-2-(λ^4-sulfanylometylo)propanowy (PIN)
[nie kwas 3-(λ^6-sulfanylo)-2-(λ^4-sulfanylometylo)propanowy; struktura macierzysta zawiera podstawnik o wyższej wiązalności, ‘$\lambda^6 > \lambda^4$’]

P-45.3.2 W preferowanej nazwie IUPAC podstawniki o wyższej wiązalności wymieniane jako przedrostki mają niższe zestawy lokantów.

Przykłady:



1-[3-(2λ^5-difosfan-1-ylo)fenylo]-1λ^5-difosfan (PIN)
[nie 2-[3-(1λ^5-difosfan-1-ylo)fenylo]-1λ^5-difosfan]
Wyjaśnienie: lokant ‘1’ dla podstawnika o niestandardowej wiązalności w PIN jest wyższy od lokantu ‘2’ w drugiej nazwie.



kwas 4-(λ^5-fosfanylo)-5-fosfanylo-2-[3-(λ^5-fosfanylo)-2-fosfanylopropylo]pentanowy (PIN)

[nie kwas 5-(λ^5-fosfanylo)-4-fosfanylo-2-[2-(λ^5-fosfanylo)-4-fosfanylo-2-[2-(λ^5-fosfanylo)-3-fosfanylopropylopropylo]pentanowy];

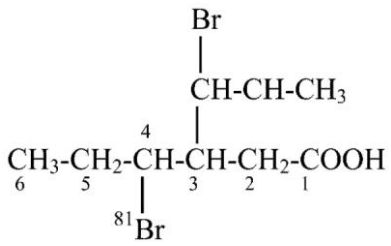
Wyjasnienie: Lokant '4' dla podstawnika o niestandardowej wiązalności w PIN jest niższy od lokantu '5' w drugiej nazwie.

P-45.4 KRYTERIA ODNOSZĄCE SIĘ TYLKO DO MODYFIKACJI IZOTOPOWYCH, PRZY RÓWNOCENNOŚCI POZOSTAŁYCH KRYTERIÓW

Podane niżej kryteria odnoszą się tylko do podstawników o niestandardowej wiązalności i stosuje się je kolejno, aż do osiągnięcia decyzji, przy spełnieniu wcześniejszych kryteriów.

P-45.4.1 Preferowana nazwa IUPAC opiera się na starszej strukturze macierzystej posiadającej większą liczbę podstawników modyfikowanych izotopowo.

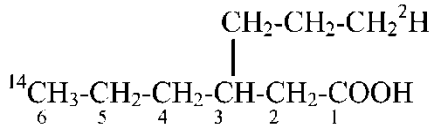
Przykład:



kwas 4-(^{81}Br)bromo-3-(1-bromopropylo)heksanowy (PIN)
[nie kwas 4-bromo-3-(1-(^{81}Br)bromopropylo)heksanowy; w obu nazwach wymienione są dwa podstawniki i taki sam zestaw lokantów '3,4'; w PIN podstawnik modyfikowany izotopowo jest połączony z głównym łańcuchem]

P-45.4.2 Preferowana nazwa IUPAC opiera sie na starszej strukturze macierzystej mającej więcej nuklidów o wyższej liczbie atomowej.

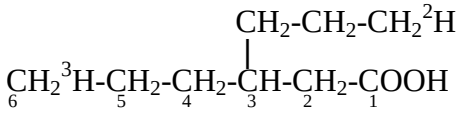
Przykład:



kwas 3-[(3-$^2H_1$)propan-1-ylo](6-^{14}C)heksanowy (PIN)
[nie kwas 3-[(3-^{14}C)propan-1-ylo] (6-$^2H_1$)heksanowy; w obu nazwach występuje jeden podstawnik i ten sam lokant, '3'; struktura macierzysta w PIN zawiera nuklid o wyższej liczbie atomowej, $^{14}C > {}^2H$]

P-45.4.3 Preferowana nazwa IUPAC opiera się na strukturze macierzystej mającej więcej nuklidów o większej liczbie masowej.

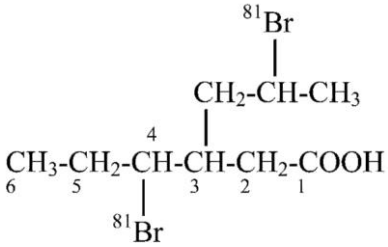
Przykład:



kwas 3-[(3-$^{2}H_1$)propan-1-ylo](6-$^{3}H_1$)heksanowy (PIN)
[nie kwas 3-[(3-$^{3}H_1$)propan-1-ylo](6-$^{2}H_1$)heksanowy; w obu nazwach występuje jeden podstawnik i ten sam lokant, '3'; w strukturze macierzystej występuje nuklid o wyższej masie atomowej, (^{3}H) > (^{2}H)]

P-45.4.4 Preferowana nazwa IUPAC opiera się na starszej strukturze macierzystej, w której izotopowo modyfikowane podstawniki mają najniższe lokanty.

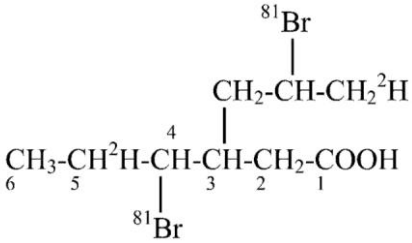
Przykłady:



kwas 4-(^{81}Br)bromo-3-[2-(^{81}Br)bromopropylo]heksanowy (PIN)
[nie kwas 5-(^{81}Br)bromo-3-[1-(^{81}Br)bromopropylo]heksanowy; w strukturze macierzystej PINu podstawnik modyfikowany izotopowo ma najniższy lokant, '4-(^{81}Br)bromo > 5-(^{81}Br)bromo']

P-45.4.5 Preferowana nazwa IUPAC opiera sie na starszej strukturze macierzystej, w której nuklidy o wyższych liczbach atomowych mają najniższe lokanty.

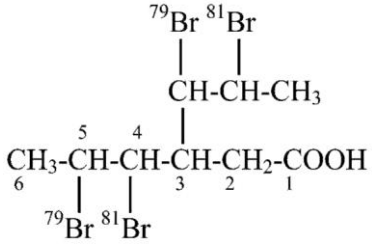
Przykład:



kwas 4-(^{81}Br)bromo-3-[2-(^{81}Br)bromo-(3-$^{2}H_1$)propylo]-(5-$^{2}H_1$)heksanowy (PIN)
[nie kwas 5-(^{81}Br)bromo-3-[1-(^{81}Br)bromo-2-($^{2}H_1$)propylo]-6-($^{2}H_1$)heksanowy; w strukturze macierzystej PINu podstawnik z nuklidem o wyższej liczbie atomowej ma najniższy lokant, '4-(^{81}Br)bromo > 4-(^{81}Br)bromo']

P-45.4.6 Preferowana nazwa IUPAC opiera sie na starszej strukturze macierzystej, w której nuklidy o wyższych liczbach masowych mają najniższe lokanty (patrz także P-45.5.2).

Przykład:



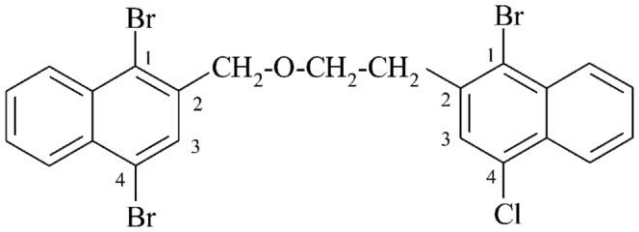
kwas 5-(^{79}Br)bromo-4-(^{81}Br)bromo-3-[1-(^{79}Br)bromo-2-(^{81}Br)bromopropylo]heksanowy (PIN)
[nie kwas 4-(^{79}Br)bromo-5-(^{81}Br)bromo-3-[2-(^{79}Br)bromo-1-(^{81}Br)bromopropylo]heksanowy; w strukturze macierzystej PINu podstawnik zawierający nuklid o najwyższej liczbie masowej ma najniższy lokant, '4-(^{81}Br)bromo > 5-(^{81}Br)bromo']

P-45.5 KRYTERIA ZWIĄZANE Z ALFANUMERYCZNYM PORZĄDKIEM NAZW

P-45.5.1 Preferowana nazwą IUPAC jest nazwa występująca wcześniej w uszeregowaniu alfanumerycznym (patrz P-14.5). Najpierw rozpatruje sie litery alfabetu w kolejności, w jakiej występują w nazwie; drukowane litery rozpatruje sie przed pisanymi kursywą, o ile nie są one używane jako lokanty ani nie są częścią zespolonego albo złożonego lokantu, np, '*N*' czy '4a'. Wtedy, jeżeli wciąż jest wybór, liczbowe lokanty rozpatruje się w kolejności ich pojawiania się w nazwie.

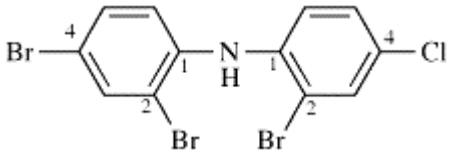
Przykłady:

(1)



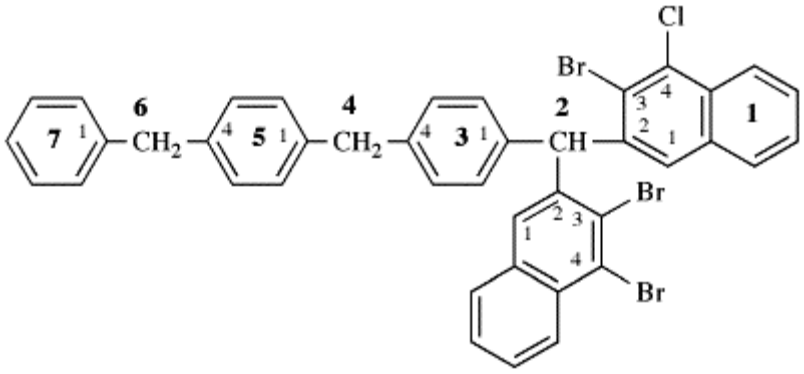
1-bromo-4-chloro-2-{2-[(1,4-dibromonaftalen-2-ylo)metoksy]etylo}naftalen (PIN)
[nie 1,4-dibromo-2-{[2-(1-bromo-4-chloronaftalen-2-ylo)etoksy]metylonaftalen; w obu nazwach zestaw lokantów jest '1,2,4' i lokanty występują w obu nazwie w tym w tym samym porządku, '1,4,2', tak że nie można podjąć decyzji na podstawie P-45.2.2 lub P-45.2.3; ale 'bromo' w PIN jest alfabetycznie przed 'dibromo']

(2)



2-bromo-4-chloro-*N*-(2,4-dibromofenylo)anilina (PIN)
[nie 2,4-dibromo-*N*-(2-bromo-4-chlorofenylo)anilina; w obu nazwach niższy zestaw lokantów jest '*N*,2,4' i lokanty występują w nazwie w tym samym porządku '2,4,*N*'; tak że nie można podjąć decyzji na P-45.2.2 lub P-45.2.3; ale 'bromo' w PIN jest alfabetycznie przed 'dibromo']

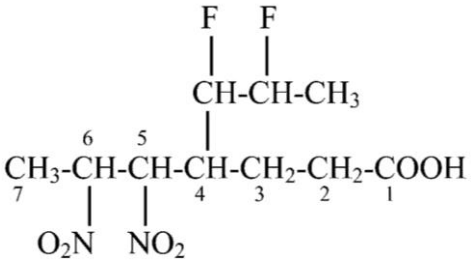
(3)



1^3-bromo-1^4-chloro-2-(3,4-dibromonaftalen-2-ylo)-1(2)naftalena-3,5(1,4),7(1)-tribenzenaheptafan (PIN)

[nie 1^3,1^4-dibromo-2-(4-chloro-3-bromonaftalen-2-ylo)-1(2)naftalena-3,5(1,4)-7(1)-tribenzenaheptafan; w obu nazwach niższy zestaw lokantów '1^3,1^4,2' i lokanty występują w tej samej kolejności '1^3,1^4,2' tak ze nie jest możliwe podjęcie decyzji na podstawie P-45.2.2 lub P-45.2.3; ale 'bromo' w PIN jest alfabetycznie przed fibromo.

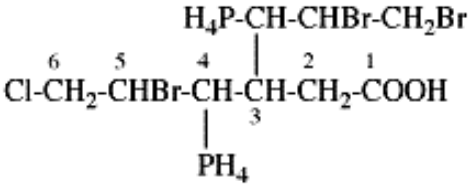
(4)



kwas 4-(1,2-difluoropropylo)-5,6-dinitroheptanowy (PIN)

[nie kwas 4-(1,2-dinitropropylo)-5,6-difluoroheptanowy; w obu nazwach niższy zestaw lokantów jest '4,5,6' i lokanty w obu nazwach występuja w obu nazwach w tym samym porządku '4,5,6'; tak ze decyzji nie można na podstawie P-45.2.2 lub P-45.2.3; ale 'difluoropropyl' w nazwie PIN jest alfabetycznie wcześniej od 'dinitropropyl' w drugiej nazwie]

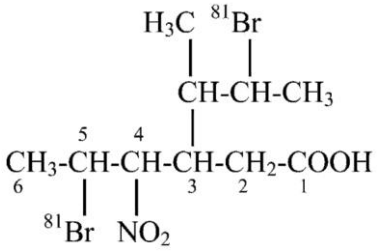
(5)



kwas 5-bromo-6-chloro-3-[2,3-dibromo-1-(λ^5-fosfanylo)propylo]- 4-(λ^5-fosfanylo)heksanowy (PIN)

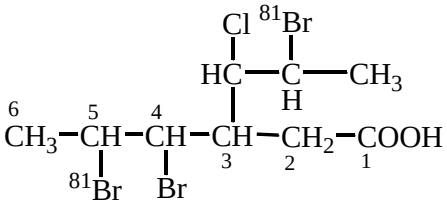
[nie kwas 5,6-dibromo-3-[2-bromo-3-chloro-1(λ^5-fosfanylo)propylo- 4-(λ^5-fosfanylo) heksanowy; w obu nazwach niższy zestaw lokantów jest '3,5,6' i występują w tej samej kolejności w obu nazwach '5,6,3', tak że nie można podjąć decyzji na podstawie P-45.2.2 lub P-45.2.3; 'bromo' w PIN jest alfabetycznie wcześniej od 'dibromo']

(6)



kwas 5-(^{81}Br)bromo-3-[3-(^{81}Br)bromobutano-2-ylo]-4-nitroheksanowy (PIN)
[nie kwas 5-(^{81}Br)bromo-3-[2-(^{81}Br)bromo-1-nitropropylo-4-metyloheksanowy; w obu nazwach niższy zestaw lokantów jest ‘3,4,5’ i lokanty występują w obu nazwach w tym samym porządku ‘5.3.4’; tak że nie można podjąć decyzji na podstawie P-45.2.2 lub P-45.2.3; ale ‘bromo-bromo-butanyl’ w PIN jest niższy alfabetycznie od ‘bromo-bromo-nitro’]
[**Uwaga:** Litera ‘B’ z symbolu bromu nie bierze udziału w alfabetyzacji]

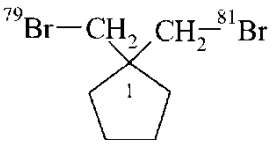
(7)



kwas 5-(^{81}Br)bromo-4-bromo-3-[2-(^{81}Br)bromo-1-chloropropylo]heksanowy (PIN)
[nie kwas 5-(^{81}Br)bromo-4-chloro-3-[2-(^{81}Br)bromo-1-bromopropylo]heksanowy; w obu nazwach niższy zestaw lokantów jest ‘3,4,5’ i lokanty występują w obu nazwach w tym samym porządku ‘5,4,3’, tak że nie można podjąć decyzji na podstawie P-45.2.2 lub P-45.2.3; ale ‘bromo….bromo’ w PIN jest niższe alfanumerycznie od ‘bromo….chloro’]
[**Uwaga:** Litera ‘B’ z symbolu bromu nie bierze udziału w alfabetyzacji]

P-45.5.2 Kiedy nazwy bazujące na porządku alfanumerycznym (z wyłączeniem izotopów i terminów stereochemicznych) są takie same, dalszy wybór zależy po pierwsze od kolejności alfabetycznej symbolu izotopowego pierwiastka, a następnie od kolejności liczbowej liczby masowej.

Przykład:



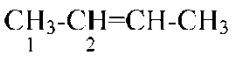
1-[(^{79}Br)bromometylo]-1-[(^{81}Br)bromometylo]cyklopentan (PIN)
[nie 1-[(^{81}Br)bromometylo]- 1-[(^{79}Br)bromometylo]cyklopentan; niższa liczba masowa w PIN ‘79’ jest starsza od ‘81’]

P-45.6 KRYTERIA ZWIĄZANE Z KONFIGURACJĄ

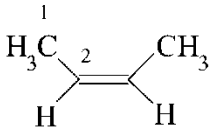
P-45.6.1 Wprowadzenie

Ten podrozdział podaje tylko główne zasady podawania konfiguracji w nazwach związków organicznych. Strukturę przestrzenną związku organicznego wskazuje się systematycznie jednym lub kilkoma afiksami dodanymi do nazwy, która sama nie wskazuje konfiguracji; takie afiksy nazywa sie ogólnie ‘stereodeskryptorami’ . Te stereodeskryptory nie zmieniają preferowanej nazwy IUPAC związku utworzonej zgodnie z zasadami nomenklatury opisanymi w innych częściach tych zaleceń (patrz P-44 i P-45), pod warunkiem, że w czasie tworzenia preferowanej nazwy IUPAC nie napotkano dotychczas na konieczność wyboru. Kiedy istnieje wybór, preferowana nazwę IUPAC należy tworzyć w zgodzie z regułami wyboru głównego łańcucha lub starszego pierścienia czy układu pierścieni, ale także w zgodzie ze starszeństwem sterodeskryptorów. Tak więc stereoizomery takie jak enancjomery i izomery *cis/trans* mają nazwy, podstawnikowe lub multiplikacyjne, różniące się jedynie stereodeskryptorami. Wszystkie stereodeskryptory opisujące preferowane nazwy IUPAC są deskryptorami Cahna-Ingolda- Preloga CIP takimi jak *E,Z,R.S,r* i *s* dyskutowanymi i opisanymi w rozdziale P-9.

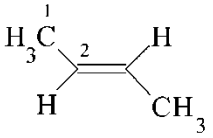
P-45.6.2 Zasady ogólne. Wybór struktury macierzystej oparty na liczbie i położeniu wiązań wielokrotnych i podwójnych (patrz P-44.4.1.1 i P-44.4.1.2) jest niezależny od konfiguracji. Na przykład, konfiguracja wiązania podwójnego alkenu nazwanego według P-31.1 może być ‘*Z*’lub ‘*E*’. Preferowane nazwy IUPAC alkenów ze stereodeskryptorami tworzy się z preferowanych nazw IUPAC.



but-2-en (PIN)



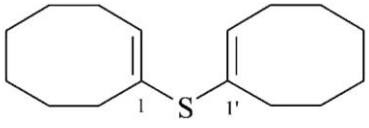
(2*Z*)-but-2-en (PIN)



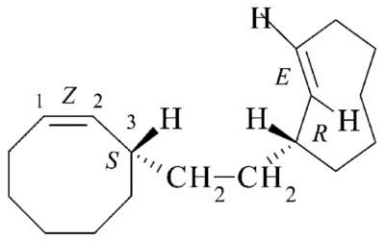
(2*E*)-but-2-en (PIN)

Z kolei nazwy multiplikacyjne (patrz P-45.1 i P-15.3) są zależne od konfiguracji jak pokazano w poniższych przykładach. Istnieją dwie różne procedury: nazwa multiplikacyjna opisująca identyczne konfiguracje (‘*E*’ lub ‘*Z*’ lub ‘*R’* lub ‘*S’*) w identycznych jednostkach i nazwa podstawnikowa do opisu różnych konfiguracji (‘*E*’ i ‘*Z*’ lub ‘*R’* i ‘*S’*) co pokazuje pierwszym przykład.

Przykład 1:

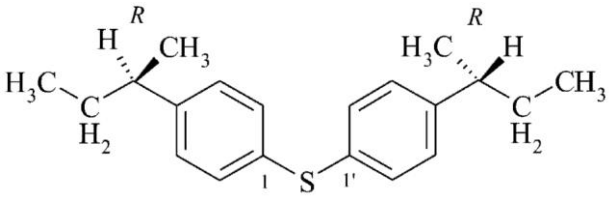


(1*E*,1′*E*)-1,1′-sulfanodiylodi[cyklookt-1-en] (PIN)
(nazwa multiplikacyjna)

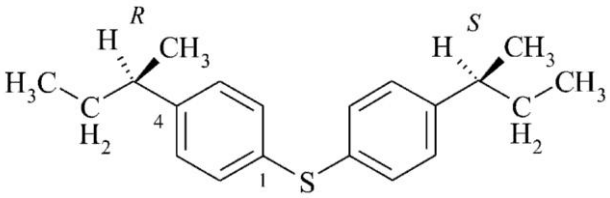


(1*Z*,3*S*)-3-{2-[(1*E*,3*R*)-cyklookt-1-en-3-ylo]etylo}cyklookt-1-en (PIN)
(1-*cis*,3*S*)-3-{2-[(1-trans,3*R*)-cyklookt-1-en-3-ylo]etylo}cyklookt-1-en
(nazwa podstawnikowa; o pierwszeństwie '*Z*' > '*E*' > '*R*' > '*S*' patrz P-92)

Przykład 2

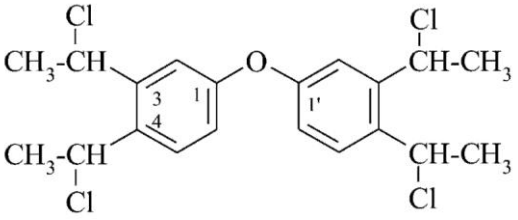


1,1′-sulfanodiylobis{4-(2*R*-butan-2-ylo]benzen (PIN)
(nazwa multiplikacyjna)

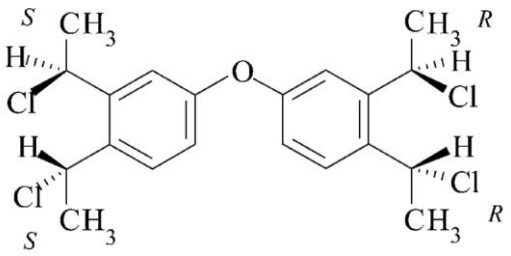


1-[(2*R*)-butan-2-ylo]-4-({-[(2*S*)-butan-2-ylo]fenylo}sulfanylo)benzen (PIN)
(nazwa podstawnikowa; nazwa multiplikacyjna nie jest dozwolona)
[nie 1-[(2*S*)-butan-2-ylo]-4-({-[(2*R*)-butan-2-ylo]fenylo}sulfanylo)benzen;
również nazwa podstawnikowa, ale ponieważ litery alfabetu i lokanty (bez symboli konfiguracyjnych) są identyczne należało porównać symbole konfiguracyjne i '*R*' wyprzedza '*S*']

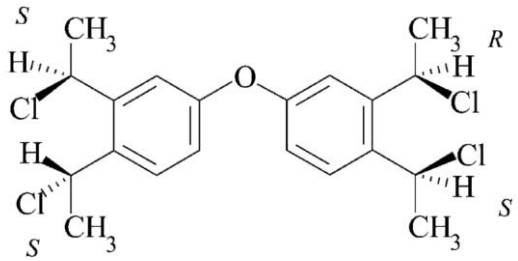
Przykład 3



1,1′-oksybis[bis(3,4-bis(1-chloroetylo)benzen] (PIN)



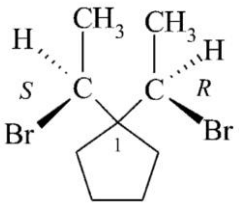
4-{3,4-bis[(1*R*)-1-chloroetylo]fenoksy}-1,2-bis[(1*S*)-1-chloroetylo]benzen (PIN)
[nie 3,4-bis[(1*S*)-1-chloroetylo]fenoksy}-1,2-bis[(1*R*)-1-chloroetylo]benzen; '*R*' wyprzedza '*S*']



1,2-bis(1*S*)-1-chloroetylo]-4-{4-[(1*S*)-1-chloroetylo]-2-[(1*R*)-1-chloroetylo]fenoksy}benzen (PIN)
(nazwa podstawnikowa, nazwa multiplikacyjna nie jest dozwolona)
[nie 4-{3,4-bis[((1*S*)-1-chloroetylo]fenoksy}-2-[(1*R*)-1-chloroetylo]-1-[(1*SI*)-1-chloroetylo]benzen; 'bis.....chloroetylo.....chloroetylo' jest alfabetycznie wcześniej od 'bis.....chloroetylofenoksy']

P-45.6.3 Kiedy nazwy utworzone w oparciu o porządek alfanumeryczny i deskryptory izotopowe są takie same, dalszy wybór zależy od kolejności deskryptorów stereochemicznych '*R*' i '*S*'.

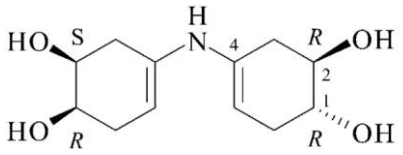
Przykład:



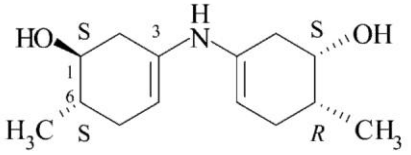
1-[(1*R*)-(1-bromoetylo)-1-(1*S*)-(1-bromoetylo)cyklopentan (PIN)
[nie 1-[(1*S*)-(1-bromoetylo)-1-(1*R*)-(1-bromoetylo)cyklopentan; '*R*' wyprzedza '*S*']

P-45.6.4 Kiedy istnieje wybór pomiędzy macierzystymi strukturami różniącymi się tylko konfiguracją wielokrotnych centrów chiralności, główny łańcuch lub starszy układ pierścieni wybiera się stosując reguły 4 i 5 sekwencji CIP, w kolejności: takie same stereodeskryptory czyli '*RR'* bądź '*SS*' mają pierwszeństwo przed różnymi, '*RS*' lub '*SR*' ('*l*' ma pierwszeństwo przed '*u'*), '*r'* ma pierwszeństwo przed '*s*' a '*R*' wyprzedza '*S*'. Reguły sekwencji CIP opisane są w P-9.

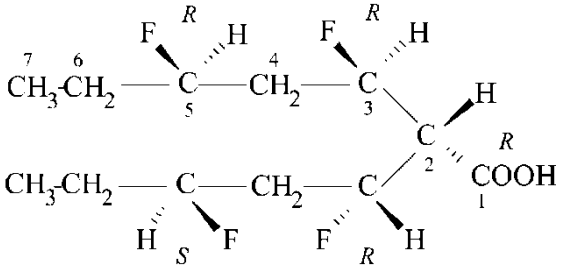
Przykłady:



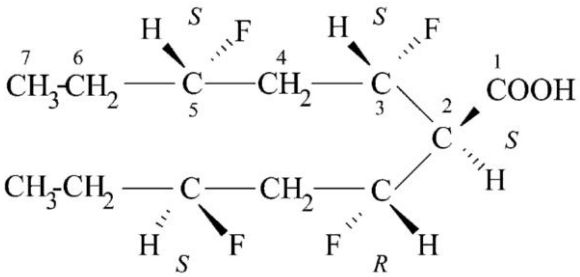
(1*R*,2*R*)-4-{[(4*R*,5*S*)-4,5-dihydroksycykloheks-1-en-1-ylo]amino}cykloheks-4-eno-1,2-diol (PIN)
[nie (1*R*,2*S*)-4-{[(4*R*,5*R*)-4,5-dihydroksycykloheks-1-en-1-ylo]amino}cykloheks-4-eno-1,2-diol; para takich samych , '*R'* ma pierwszeństwo przed parą różnych '*RS'*]



(1*S*,6*S*)-3-{[(4*R*,5*S*)-5-hydroksy-4-metylocykloheks-1-en-1-ylo]amino}-6-metylocyklokeks-3-en-1-ol (PIN)
[nie (1*S*,6*R*)-3-{[(4*S*,5*S*)-5-hydroksy-4-metylocykloheks-1-en-1-ylo]amino}-6-metylocyklokeks-3-en-1-ol; taka sama para, '*S*,*S*' ma pierwszeństwo przed różną, '*SR*']



kwas (2*R*,3*R*,5*R*)-2-(1*R*,3*S*)-1,3-difluoropentylo]-3,5-difluoroheptanowy (PIN)
[nie kwas (2*R*,3*R*,5*S*)-2-(1*R*,3*R*)-1,3-difluoropentylo]-3,5-difluoroheptanowy; taka sama trójka ('*R*,*R*,*R'*) ma pierwszeństwo przed różną ('*R*,*R*,*S*'); określenie konfiguracji każdego centrum chiralności, patrz P-92.5.1]



kwas (2*S*,3*S*,5*S*)-2-(1*R*,3*S*)-1,3-difluoropentylo]-3,5-difluoroheptanowy (PIN)
[nie kwas (2*S*,3*R*,5*S*)-2-(1*S*,3*S*)-1,3-difluoropentylo]-3,5-difluoroheptanowy; taka sama trójka, '*S*,*S*,*S*' ma pierwszeństwo przed różną, '*S*,*R*,*S*'; określenie konfiguracji każdego centrum chiralności, patrz P-92.5.1]

P-46 GŁÓWNY ŁAŃCUCH PODSTAWNIKA

P-46.0 Wprowadzenie
P-46.1 Główny łańcuch podstawnika
P-46.2 Główne łańcuchy podstawników w związkach znaczonych izotopowo
P-46.3 Główne łańcuchy podstawników w związkach z centrami stereogenicznymi

P-46.1 WPROWADZENIE

Zespolone acykliczne podstawniki związków, to jest podstawione acykliczne podstawniki składają się z głównego łańcucha i jednego lub kilku acyklicznych podstawników. Jeżeli podstawniki głównego łańcucha też mają acykliczny podstawnik lub podstawniki, to też są zespolonymi podstawnikami; powstający w wyniku tego kompletny podstawnik nazywa się kompleksowym acyklicznym podstawnikiem. Kompleksowe podstawniki nazywa się rozszerzając podane poniżej metody nazywania podstawników związku.

Zespolone podstawniki nazywa się na dwa sposoby:

(1) stosując podstawniki alkilowe [patrz P-29.2(1)]

(2) stosując podstawniki alkanylowe [patrz P-29.2(2)].

Podstawniki alkilowe i alkanylowe zostały zdefiniowane w podrozdziale P-29. W prostych podstawnikach alkilowych wolne wiązalności w pozycji 1 wskazuje się przyrostkami ‘yl’, ‘yliden’ lub ‘ylidyn’. W podstawnikach alkanylowych przyrostki ‘yl’ i 'yliden' wskazują wolne wiązalności we wszystkich pozycjach z wyjątkiem pozycji 1. Zarówno podstawniki alkilowe jak i alkanylowe mogą tworzyć zespolone podstawniki; na przykład CH_3-$C(CH_3)_2$- nazywa się 1,1-dimetyloetylem, zespoloną grupą alkilową, według metody (1); i 2-metylopropan-2-ylem, zespolonym podstawnikiem, według metody (2). Czasami zespolony podstawnik powstały w wyniku podstawienia głównego łańcucha grupą alkilową lub alkanylową okazuje sie tym samym prostym alkanylowym podstawnikiem; na przykład CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-$CH(CH_3)$- jest 1-metylopentylem według metody (1) i heksan-2-ylem według metody (2).

P-46.1 Główny łańcuch podstawnika

Wybór głównego łańcucha zespolonego podstawnika osiąga się w zgodzie z podanymi niżej kryteriami, stosowanymi kolejno w podanej kolejności, aż do osiągnięcia decyzji. Są one zgromadzone tutaj i zilustrowane w podrozdziałach od P-46.1 do P-46.1.1.

Główny łańcuch ma:

(a) największą liczbę heteroatomów; to kryterium jest stosowane tylko w metodzie (2) w P-46.0;

(b) największą liczbę atomów szkieletu, to jest, najdłuższy łańcuch;

> W acyklicznych podstawnikach porządek starszeństwa pomiędzy nienasyceniem a długością łańcucha jest odwrócony w stosunku do poprzednich zaleceń. I tak, pierwszym kryterium rozważanym przy wyborze preferowanego acyklicznego podstawnika jest długość łańcucha; nienasycenie jest obecnie słabszym kryterium [patrz (d)].

(c) większa liczba heteroatomów w kolejności: O > S > Se > Te > N > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al > Ga > In > Tl;

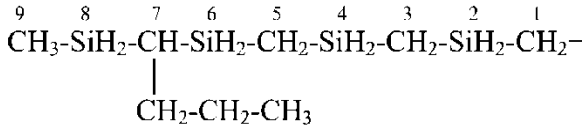
(d) większa liczba wiązań wielokrotnych niezależnie od rodzaju, następnie większa liczba wiązań podwójnych;

(e) jeden lub więcej atomów z niestandardowymi wiązalnościami;

(f) najniższe lokanty dla heteroatomów; to kryterium obowiązuje tylko w metodzie (2) w P-46.0;
(g) większa liczba heteroatomów występujących wcześniej w kolejności: O > S > Se > Te > N > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al > Ga > In > Tl;
(h) najniższe lokanty dla wolnych wiązalności dowolnego rodzaju (‘yl’, ‘yliden’, ‘ylidyn’);
(i) najniższe lokanty dla wiązań wielokrotnych niezależnie od rodzaju, następnie dla wiązań podwójnych;
(j) najniższe lokanty dla atomu(ów) o niestandardowej wiązalności;
(k) największa liczba dowolnych podstawników; to kryterium dotyczy obu metod, (1) i (2) w P-46.0;
(l) najniższe lokanty podstawników; to kryterium dotyczy obu metod, (1) i (2) w P-46.0;
(m) najniższe lokanty podstawników wymienionych wcześniej w kolejności alfanumerycznej; to kryterium dotyczy obu metod, (1) i (2) w P-46.0;

P-46.1.1 Główny łańcuch podstawnika ma najwięcej heteroatomów [kryterium (a) w P-46.1]; tp kryterium obowiązuje tylko w metodzie (2) w P-46.0.

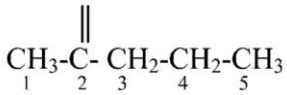
Przykład:



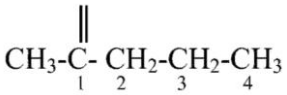
7-propylo-2,4,6,8-tetrasilanonan-1-yl (preferowany przedrostek)
[nie 7-(metylosililo)-2,4,6-trisiladekan-1-yl]

P-46.1.2 Główny łańcuch podstawnika ma największą liczbę atomów szkieletu to jest: jest najdłuższym łańcuchem [kryterium (2) w P-46.1]. To kryterium dotyczy obu metod, (1) i (2) w P-46.0; obie metody prowadzą do prostych i zespolonych podstawników.

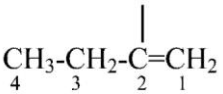
Przykłady:



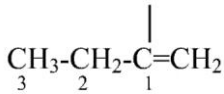
(2) pentan-2-yliden (preferowany podstawnik)
(prosty podstawnik)



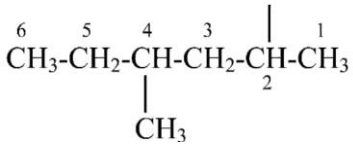
(1) 1-metylobutyliden
(zespolony podstawnik)



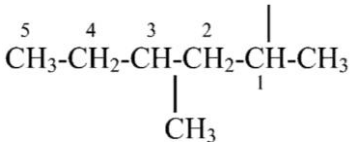
(2) but-1-en-2-yl (preferowany podstawnik)
(prosty podstawnik)



(1) 1-metylidenopropyl
(zespolony podstawnik)



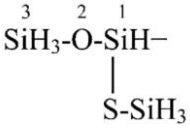
(2) 4-metyloheksan-2-yl (preferowany przedrostek)
(zespolony podstawnik)



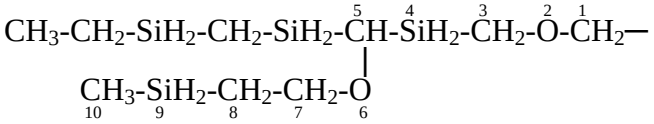
(1) 1,3-dimetylopentyl
(zespolony podstawnik)

P-46.1.3 Łańcuch główny podstawnika ma największą liczbę heteroatomów w kolejności: O > S > Se > Te > N > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al > Ga > In > Tl [kryterium (c) w P-46.1].

Przykłady:



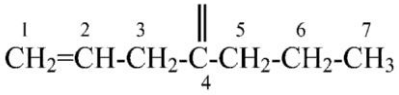
1-(sililosulfanylo)disilooksanyl (wstępnie wybrany przedrostek)
[nie 1-(sililooksy)disilatianyl; ‘O’ > ‘S’]



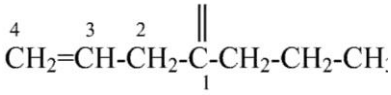
5-{[(etylosililo)metylo]sililo}-2,6-dioksa-4,9-disiladekan-1-yl (preferowany przedrostek)
[nie 5-[2-(metylosililo)etoksy-2-oksa-4,6,8-trisiladekan-1-yl; dwa tleny to więcej niż jeden]

P-46.1.4 Łańcuch główny ma więcej wiązań wielokrotnych niezależnie od rodzaju, następnie więcej wiązań podwójnych [kryterium (d) w P-46.1]; to kryterium odnosi się do metod (1) i (2) w P-46.0; obie prowadzą do prostych i zespolonych podstawników.

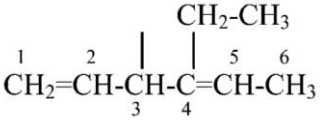
Przykłady:



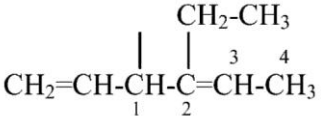
(2) hept-1-en-4-yliden (preferowany przedrostek)
(prosty przedrostek)



(1) 1-propylobut-3-en-1-yliden
(zespolony przedrostek)



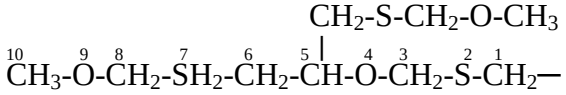
(2) 4-etyloheksa-1,4-dien-3-yl
(preferowany przedrostek)
(zespolony przedrostek)



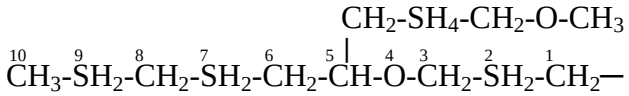
(1) 1-etenylo2-etylobut-2-en-1-yl
(zespolony przedrostek)

P-46.1.5 Główny łańcuch podstawnika ma jeden lub więcej atomów o niestandardowej wiązalności [kryterium (e) w P-46.1]. Jeżeli trzeba wybierać pomiędzy dwoma łańcuchami podstawników o niestandardowych podstawnikach to wybiera sie łańcuch mający więcej atomów o niestandardowej wiązalności. Jeżeli konieczny jest dalszy wybór między taki samymi atomami szkieletu o różnych niestandardowych wiązalnościach to o pierwszeństwie decyduje malejąca wartość wiązalności, czyli λ^6 jest starsza od λ^4 .

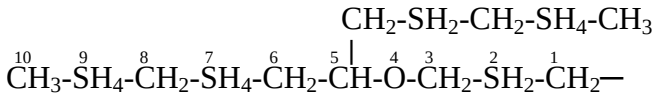
Przykłady:



5-{[(metoksymetylo)sulfanylo]metylo}-4,9-dioksa-2,7λ^4-ditiadekan-1-yl (PIN)
(preferowany przedrostek)
[nie 5-{[(metoksymetylo)-λ^4-sulfanylo]metylo}-4,9-dioksa-2,7-ditiadekan-1-yl; jeden atom o niestandardowej wiązalności *vs*. zero]



5-({[(metylosulfanylo)metylo]-λ^6-sulfanylo}metylo-4-oksa-2λ^4,7λ^4,9λ^4-tritiadekan-1-yl
(preferowany przedrostek)
[nie 5-{[metylo-λ^4-sulfanylo)metylo]-λ^4-sulfanylo]}metylo-4-oksa-2λ^4,7λ^6,9-tritiadekan-1-yl; trzy atomy o niestandardowej wiązalności *vs*. dwa]

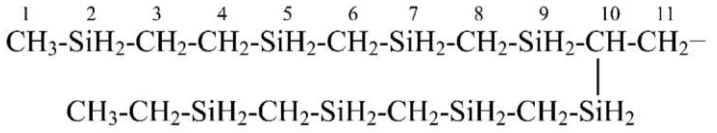


5-({[(metylo-λ^6-sulfanylo)metylo]-λ^4-sulfanylo]}metylo-4-oksa-2λ^4,7λ^6,9λ^6-tritiadekan-1-yl
(preferowany przedrostek)
[nie 5-({[(metylo-λ^6-sulfanylo)metylo]-λ^6-sulfanylo]}metylo-4-oksa-2λ^4,7λ^4,9λ^6-tritiadekan-1-yl; dwa atomy o niestandardowej wiązalności λ^6 i jeden o wiązalności λ^4 *vs*. dwa atomy λ^4 i jeden atom λ^6]

P-46.1.6 W głównym łańcuchu podstawnika lokanty heteroatomów są najniższe [kryterium (f) w P-46.1]; to kryterium odnosi sie tylko do metody (2) z P-46.0.

To jest zmiana. Heteroatomy w łańcuchach traktuje sie teraz jako część macierzystego wodorku; jako takie mają one w numerowaniu pierwszeństwo przed przyrostkami (patrz P-14.4; patrz także P-15.4.3); w wyniku tej zmiany człony ‘a’ stają się nierozłączne przy zamianie szkieletów w łańcuchach, pierścieniach i układach pierścieni.

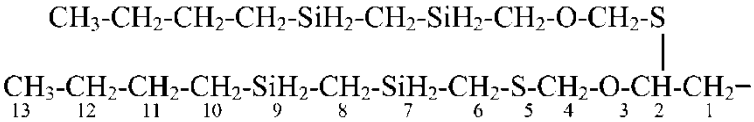
Przykłady:



10-(1,3,5,7-tetrasilanonan-1-ylo)-2,5,7,9-tetrasilaundekan-11-yl
(preferowany przedrostek)
[nie 10-(1,3,5,8-tetrasilanonan-1-ylo)-3,5,7,9-tetrasilaundekan-11-yl; zestaw lokantów w głównym łańcuchu '2,5,7,9' jest niższy od '3,5,7,9']

P-46.1.7 W głównym łańcuchu podstawnika najniższe lokanty mają heteroatomy pojawiające się w kolejności: O > S > Se > Te > N > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al > Ga > In > Tl [kryterium (g) w P-46.1]; to kryterium ma zastosowanie tylko w metodzie (2) w P-46.0.

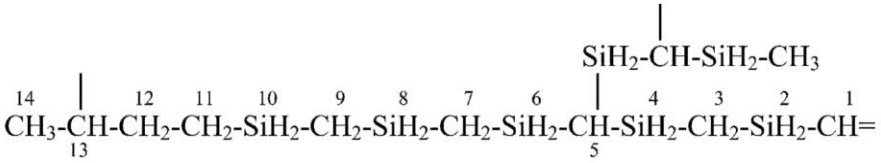
Przykład:



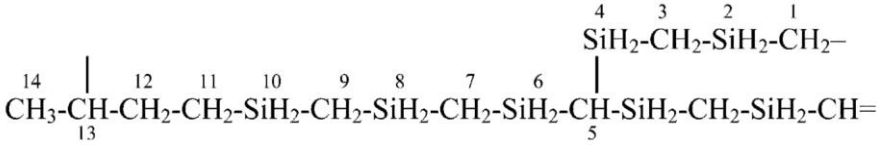
2-{[({[(butylosililo)metylo]sililo}metoksy)metylo]sulfanylo]-3-oksa-5-tia-7,9-disilatetradekan-1-yl (preferowany przedrostek)
[nie 2-{[({[(butylosililo)metylo]sililo}metoksy)metylo]sulfanylo]metoksy}-5-oksa-3-tia-7,9-disilatetradekan-1-yl; '3-oksa' jest starsze od '5-oksa']

P-46.1.8 W głównym łańcuchu podstawnika najniższe lokanty mają wolne wiązalności dowolnego rodzaju w kolejności: 'yl' > 'yliden' > 'ylidyn' [kryterium (h) w P-46.1].

Przykłady:



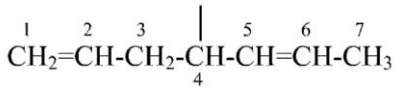
5-{[(metylosililo)ylometylo]sililo}-2,4,6,8,10-pentasilatetradekan-13-yl-1-yliden
(preferowany przedrostek)



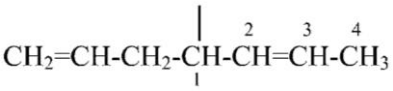
5-{[(diylometylosililo)metylo]sililo}-2,4,6,8,10-pentasilatetradekan-1,13-diyl
(preferowany przedrostek) ('ylo' jako przedrostek (patrz P-70.3.1)

P-46.1.9 W głównym łańcuchu podstawnika najniższe lokanty mają wiązania wielokrotne, niezależnie od rodzaju, a kolejno – wiązania podwójne [kryterium (i) w P-46.1]. To kryterium dotyczy obu metod, (1) i (2) w P-46.0; obie metody prowadzą do podstawników prostych i zespolonych.

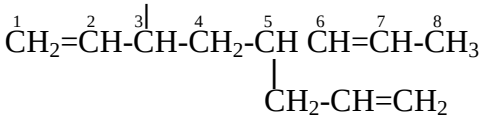
Przykłady:



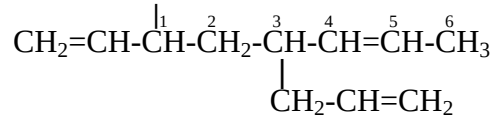
(2) hepta-1,5-dien-4-yl
(preferowany podstawnik)
(prosty podstawnik)



(1) 1-(prop-2-en-1-ylo)but-2-en-1-yl
(zespolony podstawnik)



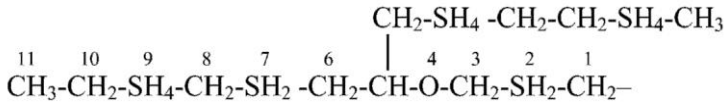
(2) 5-(prop-2-en-1-ylo)okta-1,6-dien-3-yl
(preferowany podstawnik)
(zespolony podstawnik)



(1) 1-etenylo-3-(prop-2-en-1-ylo)heks-4-en-1-yl
(zespolony podstawnik)

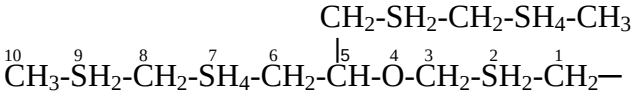
P-46.1.10 W głównym łańcuchu podstawnika najniższe lokanty ma atom(atomy) o niestandardowych wiązalnościach [kryterium (j) w P-46.1]. Jeżeli potrzebny jest dalszy wybór, najniższe lokanty ma główny łańcuch podstawnika z najwyższymi wiązalnościami.

Przykłady:



5-({[2-(metylo-λ^4-sulfanylo)etylo]-λ^4-sulfanylo}metylo)-4-oksa-2λ^4,7λ^4,9λ^6-tritiaundekan-1-yl (preferowany przedrostek)

[nie 5-({[(etylo-λ^6-sulfanylo)metylo]-λ^4-sulfanylo}metylo)-4-oksa-2λ^4,7λ^4,10λ^4-tritiaundekan-1-yl; zestaw lokantów dla λ^4 atomów '2,7,9' jest niższy od '2,7,10']



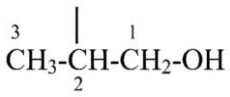
5-({[metylo-λ^6-sulfanylo)metylo]-λ^4-sulfanylo}metylo)-4-oksa-2λ^4,7λ^6,9λ^4-tritiadekan-1-yl (preferowany podstawnik)

[nie 5-({[metylo-λ^4-sulfanylo)metylo]-λ^6-sulfanylo}metylo)-4-oksa-2λ^4,7λ^4,9λ^6-tritiadekan-1-yl; w pierwszej nazwie λ^6 jest w pozycji '7', w drugiej – w pozycji '9']

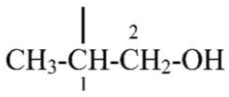
P-46.1.11 Główny łańcuch podstawnika ma najwięcej podstawników dowolnego rodzaju [kryterium (k) w P-46.1]. Kryterium ma zastosowanie w obu metodach, (1) i (2) w P-46.0; obie metody prowadzą do nazw podstawników, odpowiednio, zespolonych i kompleksowych.

Może się zdarzyć, że główny łańcuch będzie posiadał najwięcej podstawników z najwyższymi wiązalnościami. W metodzie (2) numerowanie opiera się na niskich lokantach dla podstawników z atomami o najwyższej wiązalności ([P-14.4(h)].

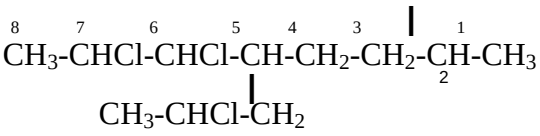
Przykłady:



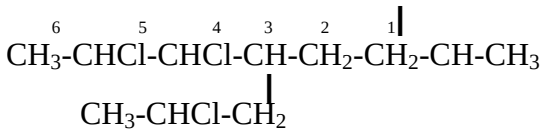
(2) 1-hydroksypropan-2-yl
(preferowany przedrostek)
(zespolony podstawnik)



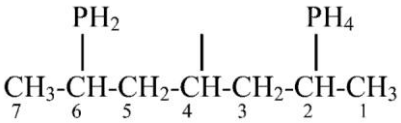
(1) 2-hydroksy-1-metyloetyl
(zespolony podstawnik)
[nie (hydroksymetylo)etyl]



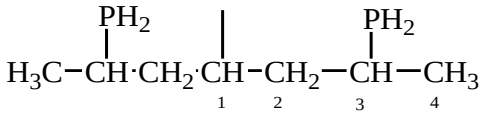
(2) 6,7-dichloro-5-(2-chloropropylo)oktan-2-yl
(preferowany przedrostek)
[nie 7-chloro-5-(1,2-dichloropropylo)oktan-2-yl; kompleksowy przedrostek]



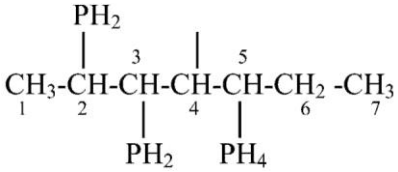
(1) 5,6-dichloro-4-(2-chloropropylo)-1-metyloheptyl
(kompleksowy przedrostek)



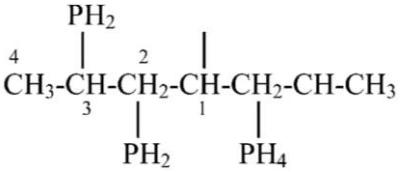
2λ^5,6-bis(fosfanylo)heptan-4-yl
(preferowany przedrostek)
(zespolony podstawnik)



3-(λ^5-fosfanylo)-1-(fosfanylopropylo)butyl
(kompleksowy przedrostek)



(2) 5-(λ^5-(fosfanylo)-2,3-bis(fosfanylo) heptan-4-yl
(preferowany podstawnik)
(zespolony podstawnik)

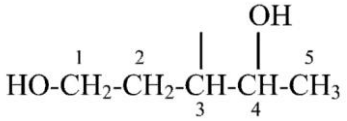


(1) 2,3-bis(fosfanylo)-1-[1-λ^5-fosfanylopropylo) butyl
(kompleksowy podstawnik)

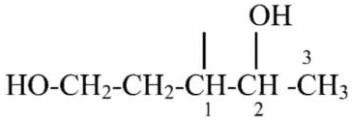
P-46.1.12 W głównym łańcuchu podstawniki mają możliwie najniższe lokanty [kryterium (l) w P-46.1]. To kryterium odnosi sie do obu metod, (1) i (2) z P-46.0; obie metody prowadzą do zespolonych i kompleksowych podstawników.

Może się zdarzyć, że główny łańcuch będzie posiadał najwięcej podstawników z najwyższymi wiązalnościami. W metodzie (2) numerowanie opiera się na niskich lokantach dla podstawników z atomami o najwyższej wiązalności ([P-14.4(h)].

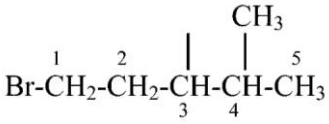
Przykłady:



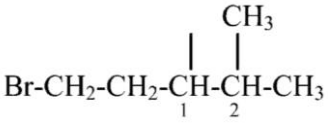
(2) 1,4-dihydroksypentan-3-yl
(preferowany przedrostek;
(zespolony podstawnik)



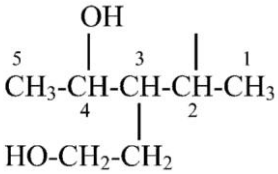
(1) 2-hydroksy-1-(2-hydroksyetylo)propyl
(kompleksowy podstawnik)



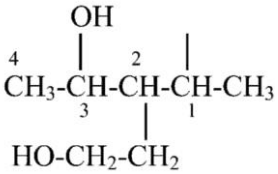
(2) 1-bromo-4-metylopentan-3-yl
(preferowany przedrostek;
(zespolony przedrostek)



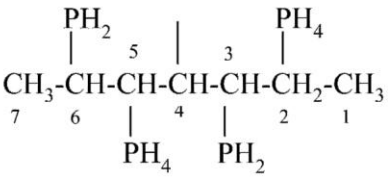
(1) 1-(2-bromoetylo)-2-metylopropyl
(kompleksowy przedrostek)



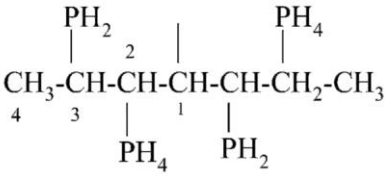
(2) 4-hydroksy-3-(2-hydroksyetylo)pentan-2-yl
(preferowany przedrostek; kompleksowy podstawnik)



(1) 3-hydroksy-2-(2-hydroksyetylo)-1-metylobutyl (kompleksowy podstawnik)



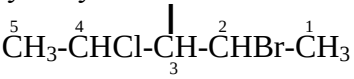
(2) 2,5-bis(λ^5-fosfanylo)-3,6-bis(fosfanylo) heptan-4-yl
(preferowany przedrostek)
[nie 3,6-bis(λ^5-fosfanylo)-2,5-bis (fosfanylo)heptan-4-yl;



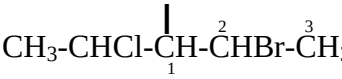
(1) 2-(λ^5-fosfanylo)-3-fosfanylo-1-[2-(λ^5-fosfanylo)-1-fosfanylopropylo]butyl

P-46.1.13 W głównym łańcuchu możliwie najniższe lokanty mają podstawniki cytowane wcześniej w porządku alfanumerycznym [kryterium (m) w P-46.1}; to kryterium odnosi sie do obu metod, (1) i (2) w P-46.0; obie metody prowadzą do nazw zespolonych i kompleksowych.

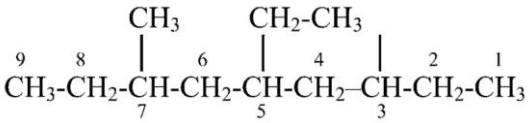
Przykłady:



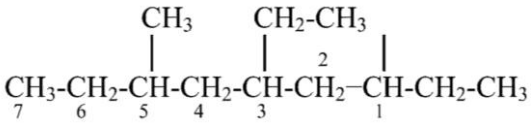
(2) 2-bromo-4-chloropentan-3-yl
(preferowany przedrostek)
(zespolony przedrostek)
[nie 4-bromo-2-chloropentan-3-yl;
'2-bromo' jest starsze od '4-bromo'



(1) 2-bromo-1-(1-chloroetylo)propyl
(kompleksowy przedrostek)
[nie 1-bromoetylo)-2-chloropropyl;
'bromo....chloro'jest starsze od 'bromoetylo']



(2) 5-etylo-7-metylononan-3-yl
(preferowany przedrostek) (zespolony podstawnik)

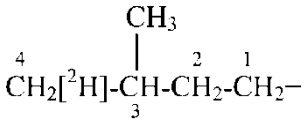


(1) (1,3-dietylo)-5-metyloheptyl
(kompleksowy podstawnik)

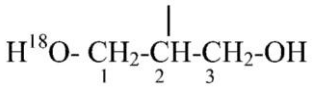
P-46.2 GŁÓWNE ŁAŃCUCHY PODSTAWNIKÓW W ZWIĄZKACH ZNACZONYCH IZOTOPOWO

P-46.2.1 Główny łańcuch zawiera najwięcej atomów modyfikowanych izotopowo

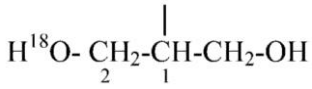
Przykłady:



(1) 3-metylo-4-[^{2}H]butyl (preferowany przedrostek



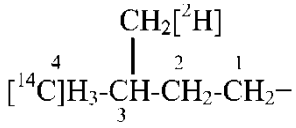
(2) 1-(1-^{18}O)hydroksy-3-hydroksypropan-2-yl (preferowany przedrostek)



(1) 2-(^{18}O)hydroksy-1-(hydroksymetylo)etyl

P-46.2.2 Główny łańcuch podstawnika zawiera więcej nuklidów o wyższej liczbie masowej lub więcej modyfikowanych izotopowo atomów lub grup podstawników.

Przykład:

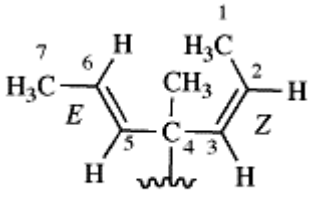


(1) 3-[^{2}H]metylo -4-[^{14}C]butyl (preferowany przedrostek)

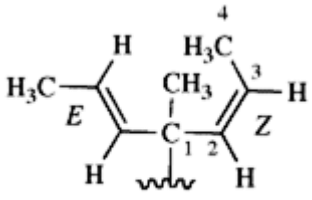
P-46.3 GŁÓWNE ŁAŃCUCHY PODSTAWNIKÓW W ZWIĄZKACH Z CENTRAMI STEREOGENICZNYMI

P-46.3.1 W głównym łańcuchu podstawnika znajduje się maksymalna liczba wiązań podwójnych *Z*.

Przykłady:



(2)

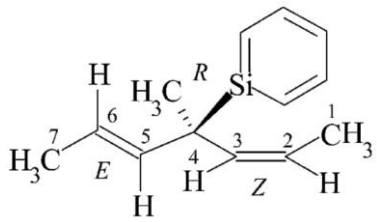


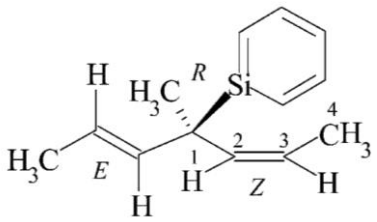
(1)

(2) (2*Z*,5*E*)-4-metylohepta-2,5-dien-4-yl (preferowany przedrostek)
(1) (2*Z*)-1-[(1*E*)-prop-1-en-1-ylo]-1-metylobut-2-en-1-yl

Uwaga: Ponieważ nieznany jest podstawnik węgla C-4, nie można oznaczyć konfiguracji w żadnej z metod, (1) czy (2). W kolejnym przykładzie podstawienie macierzystego wodorku silinem (silabenzenem) utworzy centrum chiralności na C-4 (metoda 2) lub C-1 (metoda 1)

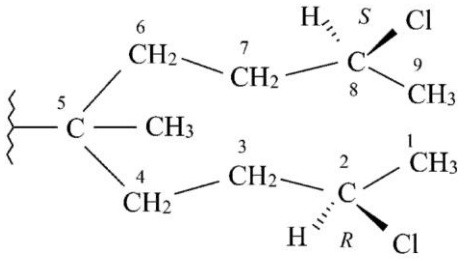
i w obu przypadkach o konfiguracji (*R*).



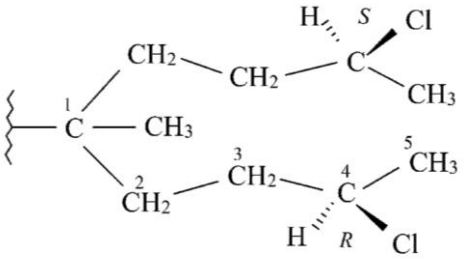


P-46.3.2 W głównym łańcuchu podstawnika występuje więcej centrów o konfiguracji (*R*).

Przykłady:



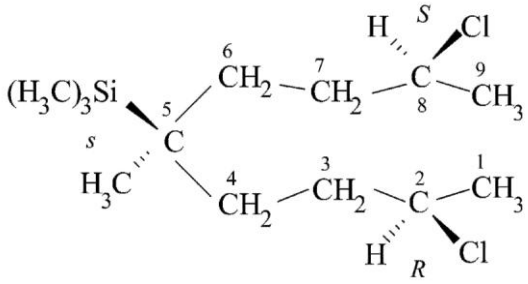
(2)

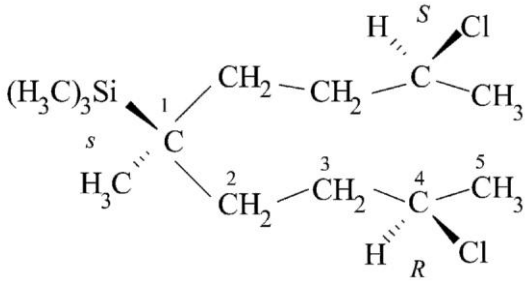


(1)

(2) (2*R*,8*S*)-2,8-dichloro-5-metylononan-5-yl (preferowany przedrostek)
(1) (4*R*)-4-chloro-1-[(3*S*)-3-chlorobutylo]-1-metylopentyl

Uwaga: Nieznane są podstawniki atomów C-5 (metoda 2) i C-1 (metoda 1) więc nie można oznaczyć konfiguracji. Podstawienie grupy trimetylosililowej w tych centrach utworzy centra chiralności na C-5 (metoda 2) lub C-1 (metoda 1) i konfigurację 's' w tych pozycjach.





ROZDZIAŁ P-5 WYBÓR PREFEROWANYCH NAZW IUPAC I TWORZENIE NAZW ZWIĄZKÓW ORGANICZNYCH

P-50 Wprowadzenie
P-51 Wybór preferowanego rodzaju nomenklatury IUPAC
P-52 Wybór preferowanych nazw IUPAC i wstępnie wybranych nazw dla macierzystych wodorków
P-53 Wybór preferowanych zachowanych nazw macierzystych wodorków
P-54 Wybór preferowanej metody modyfikowania stopnia hydrogenacji
P-55 Wybór preferowanych zachowanych nazw związków o macierzystych funkcjach
P-56 Wybór preferowanego przedrostka dla głównej grupy charakterystycznej
P-57 Wybór preferowanych i wybranych wstępnie przedrostków dla podstawników
P-58 Wybór preferowanych nazw IUPAC
P-59 Tworzenie nazwy

P-50 WPROWADZENIE

Wiele związków może mieć dwie lub więcej nazw zgodnie z kilkoma metodami ich tworzenia zalecanymi przez IUPAC, z których jedna jest tutaj zalecana jako preferowana nazwa IUPAC (PIN). W tym rozdziale zebrano reguły wyboru zalecane do tworzenia preferowanych nazw IUPAC w rozdziałach od P-1 do P-4 dla związków opisanych tamże, jak również odpowiednio w rozdziałach od P-6 do P-10. Nomenklatura podstawnikowa jest podstawowym rodzajem nomenklatury związków organicznych; jednakże zaleca się również inne jej rodzaje wówczas, gdy nomenklatura podstawnikowa nie jest zalecana, co ma miejsce dla pewnych klas związków bądź gdy pozwalają one na uproszczenie długich lub nieporęcznych nazw podstawnikowych.

W rozdziale P-1 dyskutowanych jest kilka typów nomenklatury. Wszystkie one są używane do tworzenia preferowanych nazw IUPAC i nazw w nomenklaturze ogólnej. Nomenklaturę klasowo-funkcyjną (patrz P-51.2) stosuje się do tworzenia nazw dobrze zdefiniowanych klas związków takich jak halogenki kwasowe i estry. Nomenklatura multiplikacyjna (patrz P-51.3) uwzględnia występowanie kilku takich samych struktur macierzystych w jednej cząsteczce i pozwala wyrazić całość jako struktury macierzyste. Jest to jednak dozwolone tylko pod pewnymi ograniczającymi warunkami, gdy te warunki nie są spełnione zaleca się nomenklaturę podstawnikową. Nomenklaturę zamienną (‘a’) szkieletu (patrz P-51.4) stosuje się do uproszczania nazw podstawnikowych związków acyklicznych zawierających heteroatomy (zazwyczaj przez eliminację wielu operacji grupowania); obowiązuje ona w nomenklaturze nasyconych związków heterocyklicznych mających więcej niż dziesięć członów i heteropolialicyklicznych nieskondensowanych układach pierścieni mostkowych i spiro.

Większość reguł opisanych w rozdziale P-2 jest jednoznaczna, ponieważ same przez się generują preferowane nazwy IUPAC związków cyklicznych i acyklicznych. Kiedy pierścienie, zespoły pierścieni i łańcuchy są składnikami jednej całości i same stanowią pierścienie lub zespoły pierścieni połączone lub nie łańcuchami, to przy tworzeniu preferowanych nazw IUPAC preferowana jest nomenklatura fanów; wybór nazw jest dyskutowany w P-52.2.5. Wybór preferowanych nazw IUPAC dla zespołów pierścieni omówiono w P-52.2.7. Wybór preferowanych nazw IUPAC jest także konieczny dla podstawników pochodzących od macierzystych wodorków, co opisano w rozdziale P-2.

W rozdziale P-3 rozważany jest stopień nasycenia wyrażony przedrostkami ‘hydro/dehydro’ lub końcówkami ‘en/yn’. W przypadkach grup charakterystycznych wskazywanych przedrostkami lub związków o macierzystych funkcjach, wybór następuje pomiędzy nazwami zachowanymi i systematycznymi jako składnikami preferowanych nazw IUPAC.

W rozdziale P-4 opisano różne szeregi starszeństwa. Są one jednoznaczne za wyjątkiem podstawionych struktur macierzystych, które muszą być rozpatrywane jako preferowane nazwy IUPAC. W P-44 zaprezentowano wszechstronne reguły wyboru preferowanej struktury macierzystej. Nowa koncepcja nomenklatury IUPAC nazwana ‘Wybór preferowanych nazw IUPAC’ jest opisana w P-45. Wybór preferowanej nazwy IUPAC bazuje na hierarchicznych regułach opartych na szeregach starszeństwa. Pozwala to na wyznaczenie jedynej preferowanej nazwy macierzystej opartej na najwyższej rangą macierzystej strukturze opisanej w P-44. Kwestia ta jest dyskutowana w P-58.

P-51 WYBÓR PREFEROWANEGO RODZAJU NOMENKLATURY IUPAC

P-51.0 Wprowadzenie
P-51.1 Wybór preferowanego rodzaju nomenklatury
P-51.2 Nomenklatura klasowo-funkcyjna
P-51.3 Nomenklatura multiplikacyjna
P-51.4 Nomenklatura zamienna (‘a’) szkieletu
P-51.5 Nomenklatura łączona *vs.* nomenklatura podstawnikowa

P-51.0 WPROWADZENIE

Kiedy należy dokonać wyboru pomiędzy kilkoma typami nomenklatury IUPAC stosuje się podane niżej reguły wyboru. W podrozdziałach P-51.1 do P-51.4 podano szczegółowe reguły dla każdego typu nomenklatury i przykłady.

P-51.1 WYBÓR PREFEROWANEGO RODZAJU NOMENKLATURY

Kiedy dokonuje się wyboru pomiędzy dwoma typami nomenklatury, preferowany typ wybiera się zgodnie z następującymi regułami.

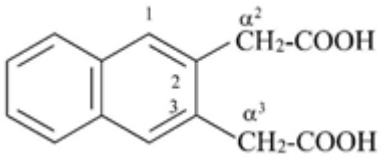
P-51.1.1 Nomenklatura podstawnikowa jest preferowana względem nomenklatury klasowo-funkcyjnej za wyjątkiem klas opisanych w P-51.2, dla których nie są przypisane żadne nazwy podstawnikowe.

Przykład:

$(CH_3)_2C=N-N=C(CH_3)_2$ azyna acetonu (patrz P-68.3.1.2.3)
1,2-di(propan-2-ylideno)hydrazyna (PIN)

P-51.1.2 Nomenklatura podstawnikowa jest preferowana względem nomenklatury łączonej

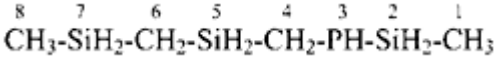
Przykład:



kwas 2,3-naftalenodioctowy (nazwa łączona)
kwas 2,2'-(naftaleno-2,3-diylo)dioctowy (PIN; nazwa podstawnikowa; patrz 15.6.1.4)

P-51.1.3 Nomenklatura zamienna (‘a’) szkieletu jest preferowana względem nomenklatury podstawnikowej kiedy w łańcuchach znajdują się heteroatomy (patrz P-51.4.1) i spełnione są kryteria dla jej użycia.

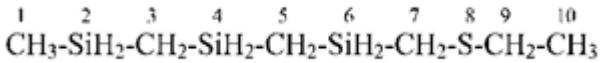
Przykład:



3-fosfa-2,5,7-trisilaoktan (PIN, nazwa zamienna (‘a’) szkieletu)
(metylosililo)({[(metylosililo)metylo]sililo}metylo)fosfan (nazwa podstawnikowa)

P-51.1.4 Nomenklatura zamienna (‘a’) szkieletu, kiedy spełnione są kryteria jej użycia, jest preferowana względem nomenklatury multiplikacyjnej (patrz P-51.4.1).

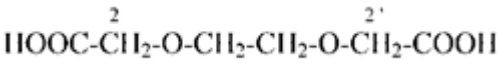
Przykład:



8-tia-2,4,6-trisiladekan (PIN, nazwa zamienna (‘a’) szkieletu)
1-[(etylosulfanylo)metylo]-1′-metylo-1,1′-[silanodiylobis(metyleno)]bis(silan) (nazwa multiplikacyjna)

P-51.1.5 Nomenklatura multiplikacyjna (P-15.3, P-51.3), kiedy spełnione są kryteria jej użycia, jest preferowana względem prostej nomenklatury podstawnikowej. Pozwala to zwielokrotniać występowanie charakterystycznych grup lub klas związków traktując je łącznie.

Przykład:



kwas 2,2′-[etano-1,2-diylobis(oksy)dioctowy (PIN, nazwa multiplikacyjna)
kwas 2-[2-(karboksymetoksy)etoksy]octowy (nazwa podstawnikowa)

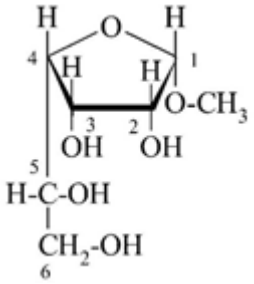
P-51.2 NOMENKLATURA KLASOWO-FUNKCYJNA

W wielu przypadkach można użyć nomenklaturę klasowo-funkcyjną i nomenklaturę podstawnikową do nadania jednemu związkowi dwóch nazw, na przykład dla CH_3-Br - bromek metylu, nazwa klasowo-funkcyjna i bromometan, nazwa podstawnikowa,. Nazwy podstawnikowe zastępują wiele nazw klasowo-funkcyjnych, ale nie wszystkie. W kontekście preferowanych nazw

IUPAC istotnym jest właściwe użycie tych dwóch rodzajów nomenklatury. W P-51.2.1 podano nazwy klasowo-funkcyjne jako preferowane nazwy IUPAC. W P-51.2.2 dyskutowane i przytoczone są nazwy klasowo-funkcyjne, które mogą być użyte w nomenklaturze ogólnej; nazwy podstawnikowe, będące preferowanymi nazwami IUPAC odpowiadającymi nazwom klasowo-funkcyjnym, patrz P-15.2.

P-51.2.1 Nomenklatury klasowo-funkcyjnej używa się do tworzenia preferowanych nazw IUPAC dla następujących grup charakterystycznych.

oksydy (tlenki) amin	$(CH_3)_3NO$ *N*-oksyd *N*,*N*-dimetylometanoaminy (PIN; P-62.5) (trimetyloazaniumylo)oksydanid
oksydy (tlenki) imin	$CH_2=N(O)Cl$ *N*-oksyd *N*-chlorometanoiminy (PIN; P-62.5) [chloro(metylideno)azaniumylo]oksydanid
halogenki acylowe	CH_3-CO-Cl chlorek acetylu (PIN; P-65.5.1.1)
azydki acylowe	CH_3-CH_2-CH_2-CO-N_3 azydek butanoilu (PIN; P-65.5.2.1)
cyjanki acylowe	CH_3-CH_2-CO-CN cyjanek propanoilu (PIN; P-65.5.2.1)
izocyjanki acylowe	C_6H_5-CO-NC izocyjanek benzoilu (PIN; P-65.5.2.1)
izocyjaniany acylowe (również dla S, Se, Te)	CH_3-CO-NCO izocyjanian acetylu (PIN; P-65.5.2.1)
estry	CH_3-CO-O-CH_3 octan metylu (PIN; P-65.6.3.2.1)
anhydrydy (bezwodniki)	CH_3-CO-O-CO-CH_2-CH_3 anhydryd octowo-propanowy (PIN; P-65.7.1)
halogenki kwasowe, pseudohalogenki [pochodne kwasów klasy 7(d) (patrz P-41)	CH_3-$N(O)Cl_2$ dichlorek metyloazonowy (PIN; P-67.1.2.5)
amidy kwasowe [pochodne kwasów klasy 7(d) (patrz P-41)]	CH_3-NH-SO-NH_2 diamid *N*-metylosiarkawy (PIN; P-67.1.2.5)
hydrazydy kwasowe [pochodne kwasów klasy 7(d) (patrz P-41]	$(CH_3)_2$P-NH-NH_2 hydrazyd dimetylofosfinawy (PIN; P-102.5.6.2.2)
glikozydy	



α-D-gulofuranozyd metylu (P-102.5.6.2.2)

P-51.2.2 Nomenklatura klasowo-funkcyjna w nomenklaturze ogólnej

Pewnej liczbie klas związków nadal można nadawać nazwy ogólne wykorzystując nomenklaturę klasowo-funkcyjną. Są one opisane w P.15.2. Dla tych klas preferowanymi nazwami IUPAC są nazwy podstawnikowe.

Przykłady:

CH_3-CH_2-CN	cyjanek etylu propanonitryl (PIN)
C_6H_5-NC	izocyjanek fenylu izocyjanobenzen (PIN)
$(CH_3)_2C$=N-N=$C(CH_3)_2$	azyna acetonu (patrz P-68.3.1.2.3) 1,2-di(propan-2-ylideno)hydrazyna (PIN)
CH_3-CH_2-CH=N-OH	oksym propanalu *N*-propylidenohydroksylamina (PIN)
$(CH_3)_2$=N-NH-CO-NH_2	semikarbazon acetonu 2-(propan-2-ylideno)hydrazynokarboksyamid (PIN)

P-51.3 NOMENKLATURA MULTIPLIKACYJNA

Nomenklaturę multiplikacyjną stosuje się do nazywania zespołów identycznych struktur macierzystych połączonych di- lub poliwalencyjnymi grupami utworzonymi zgodnie z P.15.3.2. W tym rozdziale opisano tworzenie multiplikacyjnych nazw IUPAC zgodnie z zasadami i regułami dyskutowanymi w P-15.3. Kiedy nie są spełnione warunki dla utworzenia nazw multiplikacyjnych zostaje użyta nomenklatura podstawnikowa. Ponadto, aby uprościć konstrukcję nazwy kiedy nazwa multiplikacyjna staje się skomplikowana i nieporęczna, używa się raczej nomenklatury zamiennej szkieletu (‘a’) (patrz P-15.4) i nomenklatury fanów (patrz P-26), o ile spełnione są warunki ich użycia.

> W tych zaleceniach identyczne struktury macierzyste nie muszą mieć głównych grup charakterystycznych aby można było utworzyć nazwę multiplikacyjną, co było konieczne w zaleceniach wcześniejszych.

P-51.3.1 Preferowane nazwy multiplikacyjne IUPAC

Aby nazwa multiplikacyjna stała się preferowaną nazwą IUPAC muszą zostać spełnione ściśle określone warunki. Nomenklatura multiplikacyjna ma pierwszeństwo względem nomenklatury podstawnikowej przy tworzeniu preferowanych nazw IUPAC w wyrażaniu wielokrotności pojawiania się identycznych struktur macierzystych innych niż alkany kiedy:

(1) wiązania (pojedyncze lub wielokrotne) pomiędzy centralnym podstawnikiem grupy multiplikacyjnej i wszystkimi następnymi jednostkami strukturalnymi są identyczne

(2) grupy multiplikacyjne inne niż centralna grupa multiplikacyjna, są podstawione symetrycznie

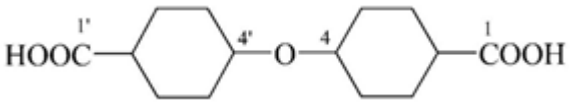
(3) lokanty wszystkich podstawników takich samych struktur macierzystych, włączając grupy wskazywane przyrostkami, są identyczne.

W tych zaleceniach, aby utworzyć nazwę multiplikacyjną, wszystkie podstawniki, włączając podstawowe grupy charakterystyczne, muszą być identyczne i mieć ten sam lokant. Jest to zmiana względem wcześniejszych zaleceń gdzie takie lokanty nie musiały być identyczne.

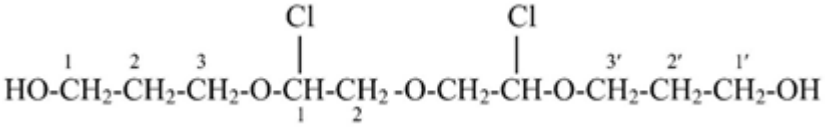
Pierwsze dwa specyficzne warunki mają odniesienie do wiązania di- lub poliwalencyjnych grup. Są one definiowane i zilustrowane w P-15.3.1.2. Proste i powiązane grupy są użyte w nazwie kiedy są spełnione warunki określone w P-15.3.1.2.1 i P.15.3.1.2.2.

Przykłady:

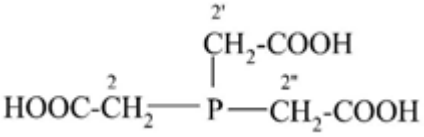
kwas 2,2′-sulfanodiylodioctowy (PIN, nazwa multiplikacyjna)
kwas [(karboksymetylo)sulfanylo]octowy (nazwa podstawnikowa)



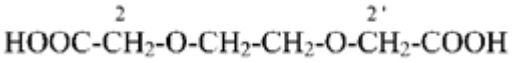
kwas 4,4′-oksydi(cykloheksano-1-karboksylowy) (PIN, nazwa multiplikacyjna)
kwas-4[(4-karboksycykloheksyl)oksy]cykloheksano-1-karboksylowy (nazwa podstawnikowa)



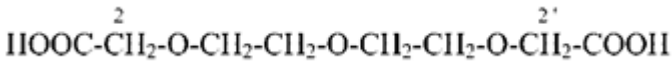
3,3′-{oksybis[(1-chloroetano-2,1-diylo)oksy]}di(propan-1-ol) (PIN, nazwa multiplikacyjna)
3-{2-[2-chloro-2-(3-hydroksypropoksy)etoksy]-1-chloroetoksy}propan-1-ol (nazwa podstawnikowa)



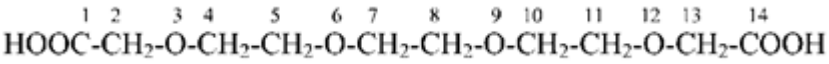
kwas 2,2′,2′′-fosfanotriylotrioctowy (PIN, nazwa multiplikacyjna)
kwas [bis(karboksymetylo)fosfanylo]octowy (nazwa podstawnikowa)



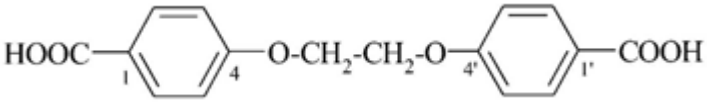
kwas 2,2′-[etano-1,2-diylobis(oksy)dioctowy (PIN, nazwa multiplikacyjna)
kwas [2-(karbometoksy)etoksy]octowy (nazwa podstawnikowa)



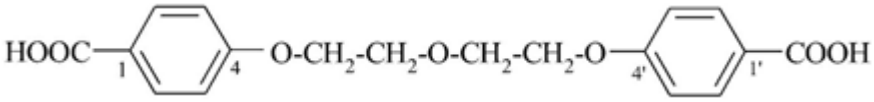
kwas 2,2′-[oksybis(etano-2,1-diyloksy)]dioctowy (PIN, nazwa multiplikacyjna)
kwas {2-[2-(karboksymetoksy)etoksy]etoksy}octowy (nazwa podstawnikowa)



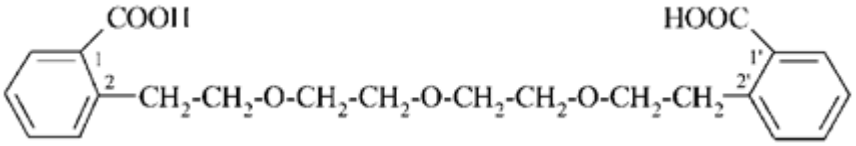
kwas 3,6,9,12-tetraoksatetradekano-1,14-diowy [PIN, nazwa zamienna (‘a’) szkieletu]
kwas 2,2′-{etano-1,2-diylobis[oksyetano-2,1-diyl)oksy]}dioctowy (nazwa multiplikacyjna)
kwas (2-{2-[2-(karboksymetoksy)etoksy]etoksy}etoksy) octowy (nazwa podstawnikowa)



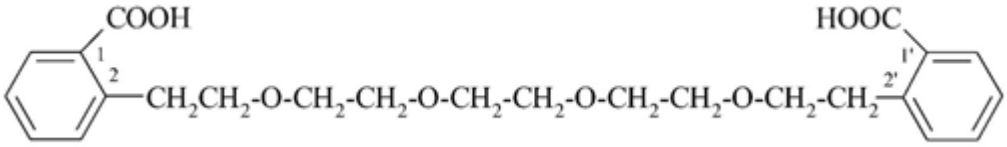
kwas 4,4′-[etano-1,2-diylobis(oksy)dibenzoesowy (PIN, nazwa multiplikacyjna)
kwas 4-[2-(4-karboksyfenoksy)etoksy]benzoesowy (nazwa podstawnikowa)



kwas 4,4′-[oksybis(etano-2,1-diyloksy)] dibenzoesowy (PIN, nazwa multiplikacyjna)
kwas 4-{2-[2-(4-karboksyfenoksy)etoksy]etoksy}benzoesowy (nazwa podstawnikowa)



kwas 2,2′-[oksybis(etano-2,1-diyloksyetano-2,1-diylo]dibenzoesowy (PIN, nazwa multiplikacyjna)
kwas 2-[2-(2-{2-[2-(2-karboksyfenylo)etoksy]etoksy}etoksy)etylo]benzoesowy (nazwa podstawnikowa)

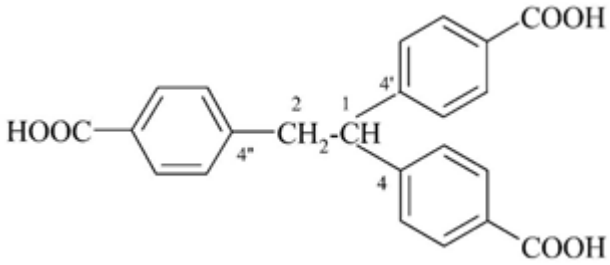


kwas 2,2′-(3,6,9,12-tetraoksatetradekano-1,14-diylo)dibenzoesowy (PIN, nazwa multiplikacyjna z wykorzystaniem nazwy zamiennej (‘a’) szkieletu jako wielokrotnie powtarzającej się grupy podstawnika)
kwas 2,2′-[etano-1,2-diylobis(oksyetano-2,1-diyloksyetano-2,1-diylo]dibenzoesowy (nazwa multiplikacyjna z wykorzystaniem prostej nomenklatury podstawnikowej)
kwas 2-{2-[2-(2-{2-[2-(2-karboksyfenylo)etoksy]etoksy}etoksy)etoksy]etylobenzoesowy (nazwa podstawnikowa)

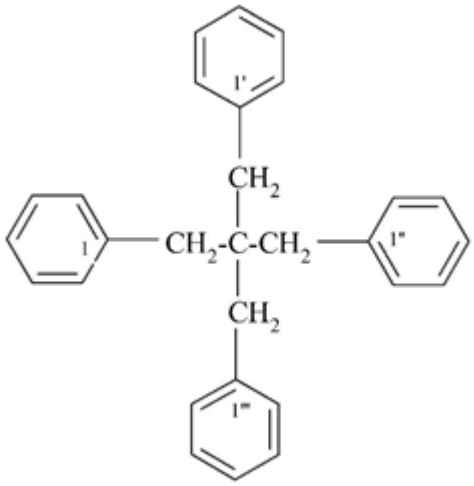
P-51.3.2. Kiedy w strukturze nazywanego związku pojawiają się więcej niż dwie identyczne struktury macierzyste, przy wyborze preferowanych nazw IUPAC powinno się postępować zgodnie z poniżej przytoczonymi regułami. Należy zwrócić uwagę, że preferowane nazwy IUPAC tworzy się z wykorzystaniem nomenklatury fanów kiedy obecne są cztery pierścienie, a dwa z nich są terminalne w układzie zawierającym minimum siedem węzłów [patrz P-52.2.5.1 (2), natomiast nomenklaturę (‘a’) szkieletu stosuje się kiedy warunki jej stosowania są spełnione jak opisano w P-15,4.3, P-.44.4 i P-51.4.

P-51.3.2.1 W nazwie multiplikacyjnej musi być wyrażona maksymalna liczba macierzystych struktur.

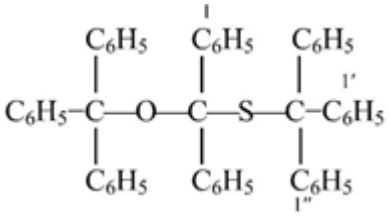
Przykłady:



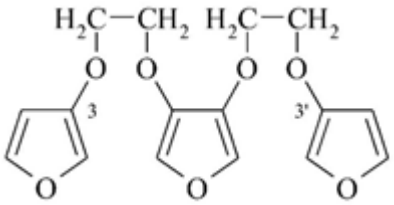
kwas 4,4′,4′′-(etano-1,1,2-triylo)tribenzoesowy (PIN)
[nie 4,4′-[2-(4-karboksyfenylo)etano-1,1-diylo)dibenzoesowy; preferowana nazwa IUPAC zwielokrotnia więcej identycznych struktur macierzystych ‘3’ w przeciwieństwie do ‘2’; patrz P-15.3.3.2.1]



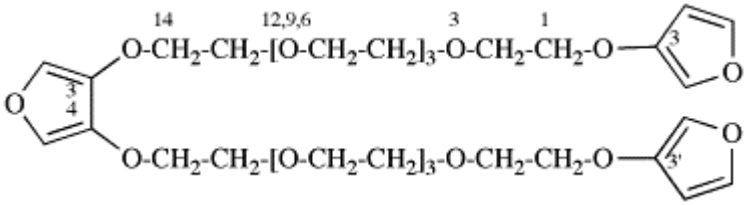
1,1′-(2,2-dibenzylopropano-1,3-diylo)dibenzen (PIN, nazwa multiplikacyjna;
nie uznaje się nazwy multiplikacyjnej z przedrostkiem takim jak neopentanotetrayl
(2,2-dibenzylo-3-fenylopropylo)benzen (nazwa podstawnikowa)



1,1′1″-({[difenylo(trifenylometoksy)metylo]sulfanylo}metanotriylo)tribenzen (PIN)
[nie 1,1′-{(trifenylometoksy)[(trifenylmetylo)sulfanyl]metyleno}dibenzen];
[nie 1,1′,1″-({difenylo[(trifenylometylo)sulfanylo]metoksy}methanotriylo)tribenzen;
ponieważ PIN jest niższy alfabetycznie (‘difenylotrifenylometoksy’ jest przed
‘difenylotrifenylometylo’)



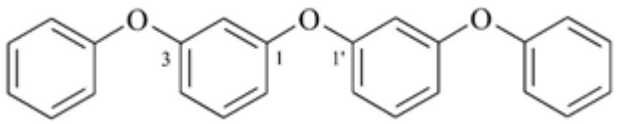
3,3′-[furano-3,4-diylobis(oksyetano-2,1-diyloksy)difuran (PIN, nazwa
multiplikacyjna)
3,4-bis[2-(furan-3-yloksy)etoksy]furan (nazwa podstawnikowa)



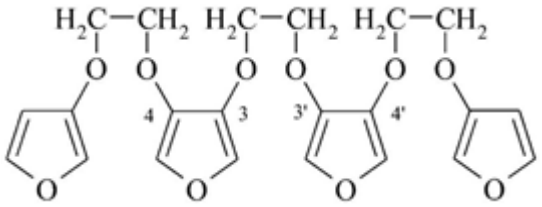
3,3′-{furano-3,4-diylobis[oksy(3,6,9,12-tetraoksatetradekano-14,1-diyl)oksy]}difuran (PIN)

P-51.3.2.2 Kiedy macierzysta struktura pojawia się częściej niż trzy razy i nie wszystkie elementy są połączone z pojedynczą multiplikacyjną grupą podstawnika, to zwielokrotnianymi są identyczne jednostki najbliższe centralnej multiplikacyjnej grupie podstawnika; inne struktury macierzyste wyrażane są w nazwie multiplikacyjnej jako podstawniki. Preferowane nazwy IUPAC tworzy się przy użyciu nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu lub nomenklatury fanów, kiedy spełnione są warunki ich użycia [patrz P-51.4 i P-52.2.5.1].

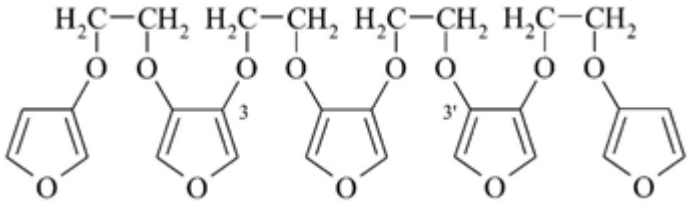
Przykłady:



1,1′-oksybis(3-fenoksybenzen) (nazwa muliplikacyjna)
[nie 1,1′-oksybis(3,1-fenylenooksy)dibenzen (nazwa multiplikacyjna)]
2,4,6-trioksa-1,7(1),3,5(1,3)-tetrabenzenoheptafan (PIN, nazwa fanów, patrz P-51.4)



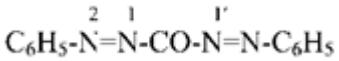
3,3′-[etano-1,2-difenylobis(oksy)]bis{4-(2-furan-3-yloksy)etoksy]furan} (nazwa multiplikacyjna)
[nie 3,3′-[etano-1,2-diylobis(oksyfurano-4,3-diylooksyetano-2,1-diyloksy)difuran (nazwa multiplikacyjna)
2,5,7,10,12,15-heksaoksa-1,16(3),6,11(3,4)-tetrafuranoheksadekafan (PIN; nazwa fanów, patrz P-51.4)



3,3′-[furano-3,4-diylobis(oksyetano-2,1-diyloksy)]bis{4-[2-furan-3-yloksy)etoksy]furan (nazwa multiplikacyjna)
[nie 3,4-bis[2-({4-[2-(furan-3-ylooksy)etoksy]furan-3-ylo}oksy)etoksy]furan (nazwa podstawnikowa)
[nie 3,3′-[furano-3,4-diylobis(oksyetano-2,1-diyloksyfurano-4,3-diyloksyetano-2,1-diyloksy]difuran (nazwa multiplikacyjna)
2,5,7,10,12,15,17,20-oktaoksa-1,21(3),6,11,16,(3,4)pentafuranahenikozafan (PIN, nazwa fanów, patrz P-51.4)

P-51.3.2.3 Kiedy trzeba dokonać wyboru pomiędzy strukturą macierzystą a składnikiem grupy multiplikacyjnej wykorzystuje się porządek starszeństwa klas (patrz P-41).

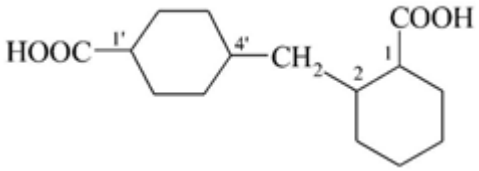
Przykład:



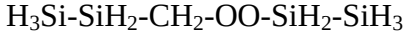
bis(fenylodiazenylo)metanon (PIN)
[nie 1,1′-[karbonylobis(2-fenylodiazen);
nie1,1′-karbonylobis(diazenodiylo)]dibenzen; metanon jest starszy zarówno od ‘diazeno’ jak i od pierścienia karbocyklicznego, patrz P-41]

P-51.3.3 Kiedy warunki (1), (2) i (3) zdefiniowane w P-51.3.1 nie są spełnione, preferowaną nazwę IUPAC tworzy się w oparciu o zasady nomenklatury podstawnikowej.

Przykłady:



kwas 2,4′-metylenodi(cykloheksano-1-karboksylowy) (nazwa multiplikacyjna)
kwas 2-[(4-karboksycykloheksylo)metylo]cykloheksano-1-karboksylowy (PIN, nazwa podstawnikowa, patrz P-45.2.2)
[nie kwas 4-[(2-karboksycykloheksylo)metylo]cykloheksano-1-karboksylowy; lokant podstawnika ‘2’ jest niższy niż ‘4’ (patrz P-44.2.2)]



[(disilanylometylo)peroksy]disilan (PIN, nazwa podstawnikowa)
[nie [(disilanyloperoksy)metylo]disilan; ‘disilanylometyloperoksy’ poprzedza ‘disilanyloperoksymetylo’ w porządku alfanumerycznym.

Więcej przykładów podano w P-15.3 w P-44,P-45, P-46 i P-47.

P-51.4 NOMENKLATURA ZAMIENNA (‘a’) SZKIELETU

Nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu używa się do tworzenia preferowanych nazw IUPAC zamiast nazw podstawnikowych lub multiplikacyjnych kiedy w acyklicznym łańcuchu są cztery lub więcej heterojednostki (patrz P-51.3.1). Dla pewnych typów związków cyklicznych nomenklatura zamienna (‘a’) szkieletu jest jedyną zalecaną metodą.

W tych zaleceniach, grupy lub atomy mające prostą nazwę poliwalencyjną traktuje się jako jednostki, stąd określenie heterojednostka obejmuje zarówno heteroatomy jak i heterogrupy. Heterogrupy nie były rozważane jako jednostki w poprzednich zaleceniach.

P-51.4.1 Nomenklatura zamienna (‘a’) szkieletu w łańcuchach acyklicznych

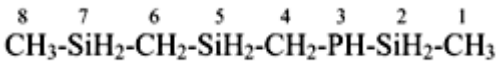
P-51.4.1.1 Dla struktur acyklicznych w których cztery lub więcej heterojednostek występuje w nierozgałęzionym łańcuchu zawierającym co najmniej jeden atom węgla i kiedy żaden z heteroatomów nie tworzy wszystkich lub części głównych charakterystycznych grup związku to do tworzenia preferowanych nazw IUPAC musi być użyta właśnie nomenklatura zamienna (‘a’) szkieletu, a nie nazwy podstawnikowe czy multiplikacyjne.

Heterojednostka jest zbiorem heteroatomów mającym własną nazwę taką jak -SS-, disulfadienyl; $-SiH_2-O-SiH_2$, disiloksano-1,3-diyl; -SOS-, ditioksanodiyl (nie $–OSiH_2O$ ani –OSO- odpowiadające trzem kolejnym jednostkom ‘oksysilanodiyloksy’ i ‘oksysulfanodiyloksy’). Kwasów takich jak kwas karbonowy lub fosforowy, arsenowy i antymonowy, kiedy reprezentują związek macierzysty lub grupę główną, nie traktuje się jako jednostki. W obecności grupy charakterystycznej mającej starszeństwo przy wskazywaniu jako przyrostek, grupa $–O-P(O)(OCH_3)-O-$ składa się z trzech jednostek (patrz siódmy przykład wskazany poniżej).

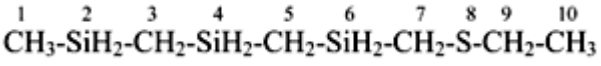
P-51.4.1.2 Nomenklatura zamienna (‘a’) szkieletu tworzy nowe acykliczne macierzyste wodorki, których numeracja jest ściśle ustalona, tak jak to ma miejsce dla pierścieni heterocyklicznych i układów pierścieniowych. Przyrostki, końcówki i przedrostki dodaje się zgodnie z ustaloną numeracją.

> Ustalona numeracja dla heteroacyklicznych struktur macierzystych nazywanych według nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu jest główną zmianą w stosunku do reguły C-06 (lit. 1), gdzie główne grupy charakterystyczne i wolna walencyjność były preferowane względem heteroatomów przy nadawaniu niższych lokantów.

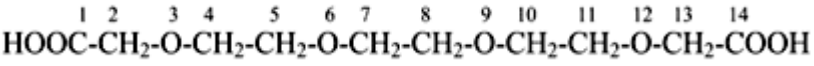
Przykłady:



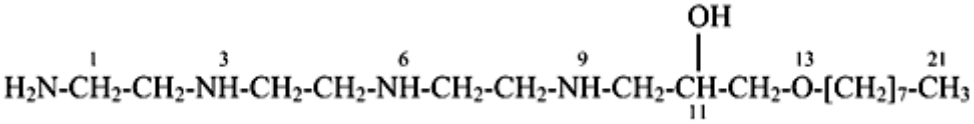
3-fosfa-2,5,7-trisilaoktan [PIN, nazwa zamienna (‘a’) szkieletu]
(metylosililo)({[(metylosililo)metylo]sililo}metylofosfan (nazwa podstawnikowa)



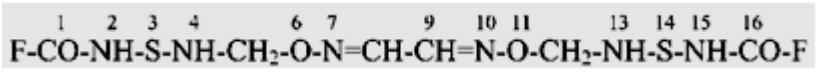
8-tia-2,4,6-trisiladekan (PIN, nazwa zamienna (‘a’) szkieletu)
1-[(etylosulfanylo)metylo]-1′-metylo-1,1′-[silanodiylobis(metyleno)]bis(silan)
(nazwa multiplikacyjna)
({[etylosulfanylo)metylo]sililo}metylo)[(metylosililo)metylo]silan
(nazwa podstawnikowa)



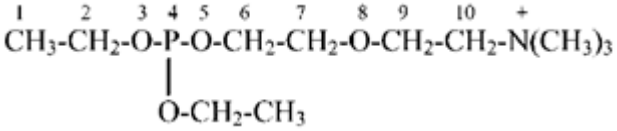
kwas 3,6,9,12-tetraoksatetradekano-1,14-diowy (PIN, nazwa zamienna (‘a’) szkieletu)
kwas 2,2′-{etano-1,2-diylobis[oksyetano-2,1-diyl)oksy]}dioctowy (nazwa multiplikacyjna)
kwas 2-(2-{2-[2-(karboksymetoksy)etoksy]etoksy}etoksy)octowy (nazwa podstawnikowa)



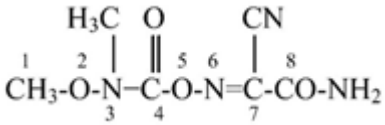
1-amino-13-oksa-3,6,9-triazahenikozan-11-ol [PIN, nazwa zamienna (‘a’) szkieletu]
1-{[2-({2-[(2-aminoetylo)amino]etylo}amino)etylo]amino}-3(oktyloksy)propan-2-ol
(nazwa podstawnikowa)



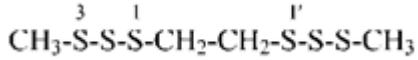
difluorek 6,11-dioksa-3,14-ditia-2,4,7,10,13,15-heksaazaheksadekano-7,9-dienodioilu [PIN, nazwa zamienna (‘a’) szkieletu] (acykliczny fluorek dioilu jest preferowany względem wielokrotnego fluorku karbamoilu)



4-etoksy-*N*,*N*,*N*-trimetylo-3,5,8-trioksa-4-fosfadekano-10-aminium (PIN)



7-cyjano-3-metylo-4-okso-2,5-dioksa-3,6-diazaokt-6-eno-8-amid (PIN)



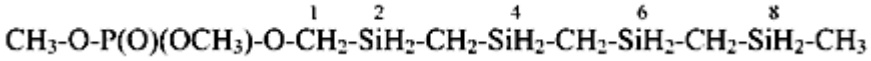
1,1′-(etano-1,2-diylo)bis(3-metylotrisulfan) (PIN)
(nie 2,3,4,7,8,9-heksatiadekan; trisulfan HS-S-SH, jest macierzystym wodorkiem i nie może być heterojednostką).

$(CH_3)_3C\text{-}OO\text{-}Si(CH_3)_2\text{-}O\text{-}CO\text{-}CH_2\text{-}CH_3$

propanian (*tert*-butyloperoksy)dimetylosililu (PIN)
[nie 2,2,5,5-tetrametylo-3,4,6-trioksa-5-silanonan-7-on; występują tylko dwie heterojednostki: −OO− i −Si− ; główną grupa charakterystyczną jest ester, a −O− jest jego częścią]

$CH_3\text{-}O\text{-}PH(O)\text{-}O\text{-}CH_2\text{-}O\text{-}CH_3$

fosfonian metoksymetylu-metylu (PIN)
[nie 2,4,6-trioksa-3λ^5-fosfaheptan-3-on; trzy heteroatomy –O-P-O– są częścią estru i są wyrażone jako główna grupa charakterystyczna; to pozostawia tylko jedną heterojednostkę, –O–, wobec czego jako PIN nie może być użyta nomenklatura zamienna (‘a’) a szkieletu]

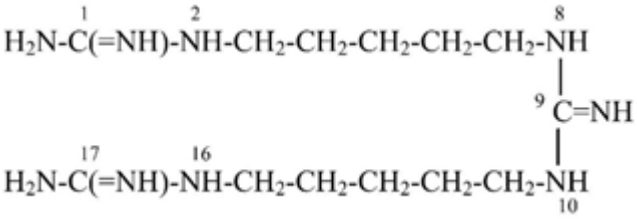


fosforan dimetylu-2,4,6,8-tetrasilanonan-1-ylu (PIN)

[trzy heteroatomy –O-P-O– są częścią estru i są wyrażone jako główna grupa charakterystyczna; ale ponieważ w jednej organicznej części estru są cztery atomy krzemu to do jej nazwania użyto nomenklaturę zamienną (‘a’) szkieletu]

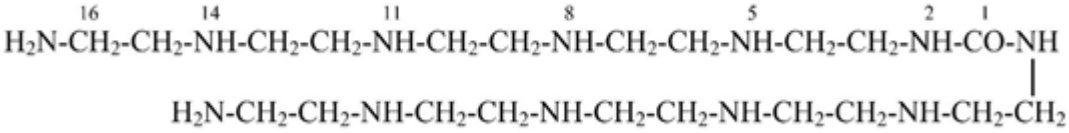
P-51.4.1.3 W nazwach zamiennych (‘a’) szkieletu musi być obecna taka sama liczba grup charakterystycznych jaka byłaby wyrażona za pomocą przyrostków w nazwach podstawnikowych:

Przykłady:



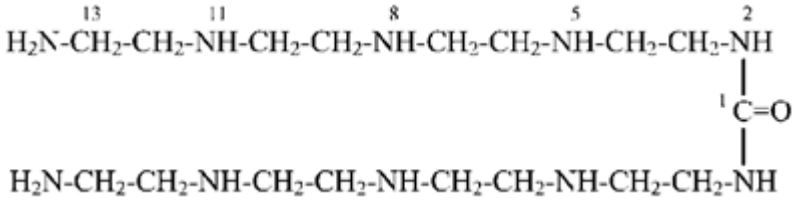
9-imino-2,8,10,16-teraazaheptadekanodiimidoamid (PIN)

(diimidoamid wyrażony jako główna grupa charakterystyczna jest starszy względem diamid karbonoimidowy)

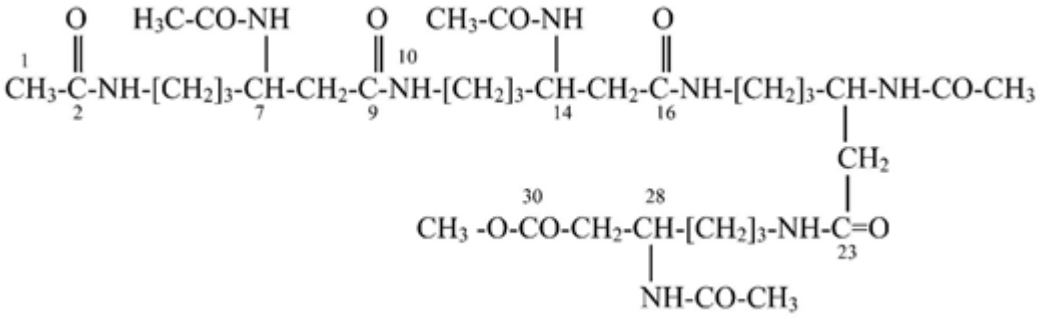


16-amino-*N*-(14-amino-3,6,9,12-tetraazatetradekan-1-ylo)-2,5,8,11,14-pentaazaheksadekanoamid

[PIN; amid wyrażony jako główna grupa charakterystyczna jest starszy względem mocznika, diamidu karbonowego, i aminy wyrażonej jako główna grupa charakterystyczna; ponieważ cztery heteroatomy także są obecne w grupie *N*-podstawionej musi ona być również nazwana przy użyciu nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu]



13-amino-*N*-(2-{[2-({2-[(2-aminoetylo)amino]etylo}amino)etylo]amino}etylo)-2,5,8,11-tetraazatridekanoamid (PIN; amid wyrażony jako główna grupa charakterystyczna jest starszy względem mocznika, diamidu karbonowego, i aminy wyrażonej jako główna grupa charakterystyczna; ponieważ tylko trzy heteroatomy są obecne w *N*-podstawniku, związek musi być nazwany podstawnikowo

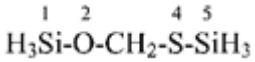


7,14,21,28-tetraacetamido-2,8,16,23-tetraokso-3,10,17,24-tetraazatriakontan-30-ian metylu
(PIN; ester jest starszy względem amidu lub ketonu)

P-51.4.1.4 Łańcuch musi być zakończony atomem C lub jednym z następujących heteroatomów: P, As, Sb, Bi, Si, Ge, Sn, Pb, B, Al, Ga In lub Tl.

> W tych zaleceniach heterołańcuchy mogą być zakończone heteroatomami, niekoniecznie atomami węgla. Poprzednie zalecenia wymagały, aby heterołańcuch był zakończony atomem węgla.

Przykład:



2-oksa-4-tia-1,5-disilapentan (PIN)

P-51.4.2 Nomenklatura zamienna (‘a’) szkieletu związków cyklicznych

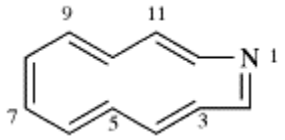
Nomenklatura zamienna (‘a’) szkieletu jest jedyną zalecaną metodą tworzenia nazw niektórych związków heterocyklicznych.

P-51.4.2.1 Nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu używa się do tworzenia preferowanych nazw IUPAC heteromonocyklicznych związków mających więcej niż dziesięć atomów w pierścieniu (patrz P-22.2.3).

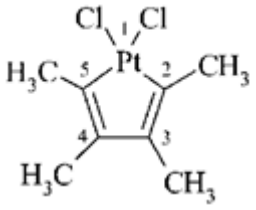
Nomenklaturę zamienną (‘a’) szkieletu można także stosować w przypadku pierścieni mniejszych niż dziesięcioczłonowe jeżeli przedrostek nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu reprezentuje metal, co zdefiniowano w P-69.4.

> Adaptacja zasad systemu Hantzscha-Widmana do pierwiastków grup 1-12 przez włączenie ich przedrostków nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu mogłaby być największą zmianą względem poprzednich zaleceń, chociaż związki metaloorganiczne zawierające te pierwiastki są aktualnie jedynie wstępnie wybranymi.

Przykłady:



1-azacyklododeka-1,3,5,7,9,11-heksaen (PIN)

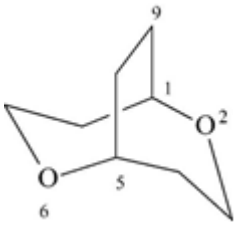


1,1-dichlorydo-2,3,4,5-tetrametyloplatynol (nazwa Hantscha-Widmana)
1,1-dichlorydo-2,3,4,5-tetrametylo-1-platynacyclopenta-2,4-dien
(nazwa zamienna (‘a’) szkieletu ; patrz P-69.4)

Opcja dodatkowego włączenia pierwiastków grup od 13 do 16 w systemie Hantzscha-Widmana i ich przedrostków nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu (patrz P-69.4) jest największą zmianą względem poprzednich zaleceń.

P-51.4.2.2 Nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu używa się do tworzenia preferowanych nazw IUPAC heterocyklicznych układów pierścieniowych von Baeyera (patrz P-23.3.1).

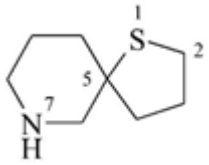
Przykład:



2,6-dioksabicyklo[3.3.2]dekan (PIN)

P-51.4.2.3 Nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu używa się do tworzenia preferowanych nazw IUPAC heterocyklicznych macierzystych wodorków spiro zawierających dwa lub więcej nasycone pierścienie (patrz P-24.2.4.1.1).

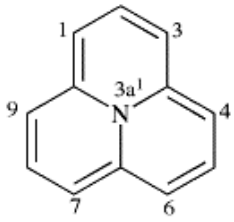
Przykład:



7-aza-1-tiaspiro[4,5]dekan (PIN)

P-51.4.2.4 Nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu używa się do tworzenia preferowanych nazw IUPAC heteropolicyklicznych układów, dla których nie stosuje się nomenklatury skondensowanej opartej na macierzystych pierścieniach heterocyklicznych (patrz P-25.5.1).

Przykład:

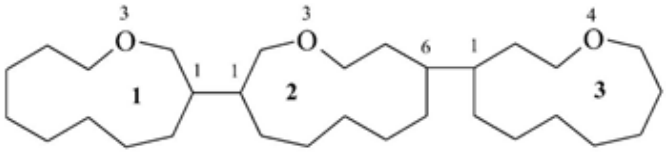


pirydo[2,1,6-*de*]chinolizyna (PIN)
3a^1-azafenalen
[nie 9b-azafenalen; patrz P-25.3.3.3]

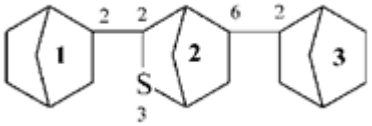
P-51.4.2.5 Nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu używa się do tworzenia preferowanych nazw IUPAC układów pierścieni heterofanów (patrz P-26.5) i dla heterofullerenów (patrz P-27.5).

P-51.4.2.6 Kiedy jest to konieczne, wyboru preferowanej nazwy IUPAC dla heterocyklicznej struktury macierzystej dokonuje się przed wskazaniem przedrostków zamiennych (‘a’) szkieletu. Tak jest w przypadku zbiorów identycznych związków heterocyklicznych (patrz P-28.4) składających się ze związków heterocyklicznych typu von Baeyera i ze związków monocyklicznych mających więcej niż dziesięć członów.

Przykłady:



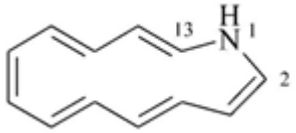
$1^{3},2^{3},3^{4}$-trioksa-$1^{1},2^{1}$:$2^{6},3^{1}$-tercykloundekan (PIN; patrz P-28.3.1)
3,3′,4″-trioksa-1,1′:6′,1″-tercykloundekan
(nie $1^{3},2^{3}$:$2^{9},3^{4}$-ter-1-oksacykloundekan)



2^{3}-tia-$1^{2},2^{2}$:$2^{6},3^{2}$-terbicyklo[2.2.1]heptan (PIN; patrz P-28.3.1)
{nie 2,6-bis(bicyklo[2.2.1]heptan-2-ylo)-3-tiabicyklo[2.2.1]heptan}
3′-tia-2,2′:6′,1″-terbicyklo[2.2.1]heptan

P-51.4.2.7 Wybór pomiędzy dwoma lub większą liczbą akceptowalnych nazw może zależeć od rodzaju użytej nomenklatury. Tak jest w przypadku nienasyconych związków heteromonocyklicznych, dla których akceptowalne są trzy nazwy, co przedyskutowano w P-52.2.3.

Przykład:



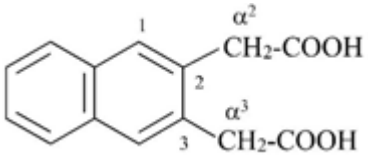
1-azacyklotrideka-2,4,6,8,10,12-heksaen [PIN; nazwa zamienna (‘a’) szkieletu]
1-azacyklotridecyn [nazwa zamienna (‘a’) szkieletu do użycia w nomenklaturze skondensowanej]
1*H*-1-aza[13]annulen

P-51.5 NOMENKLATURA ŁĄCZONA *vs.* NOMENKLATURA PODSTAWNIKOWA

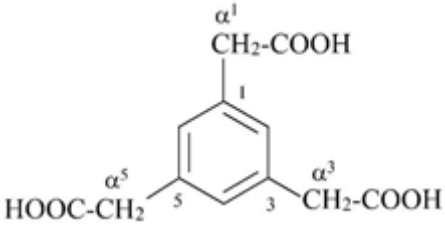
Kiedy istnieje wybór między nomenklaturą skondensowaną i nomenklaturą podstawnikową, preferowane nazwy IUPAC tworzy się stosując nomenklaturę podstawnikową (włączając

nomenklaturę multiplikacyjną i nomenklaturę zamienną (‘a’) szkieletu, o ile spełnione są warunki ich użycia) (patrz P-51).

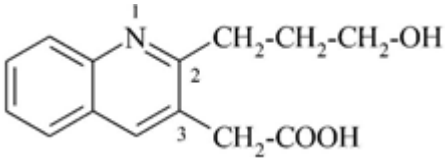
Przykłady:



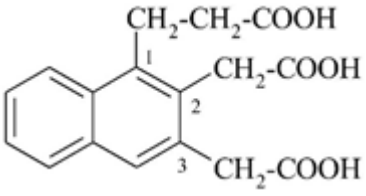
kwas 2,2′-(naftaleno-2,3-diylo)dioctowy (PIN)
kwas naftaleno-2,3-dioctowy



kwas benzeno-1,3,5-trioctowy
kwas 2,2′,2′-(benzeno-1,3,5-triylo)trioctowy (PIN)



kwas 2-(3-hydroksypropylo)chinolino-3-octowy
kwas [2-(3-hydroksypropylo)chinolin-3-ylo]octowy (PIN)
(kwas karboksylowy jest starszy od alkoholu)



kwas 1-(2-karboksyetylo)naftaleno-2,3-dioctowy
kwas 3-[2,3-bis(karboksymetylo)naftalen-1-ylo]propanowy (PIN)

P-52 WYBÓR PREFEROWANYCH NAZW IUPAC I WSTĘPNIE WYBRANYCH NAZW (patrz P-12.2) DLA MACIERZYSTYCH WODORKÓW

Kiedy dostępna jest tylko jedna metoda tworzenia nazw macierzystych wodorków (patrz rozdział P-2) utworzone pojedyncze nazwy są oczywiście preferowanymi nazwami IUPAC. Natomiast gdy do tworzenia nazw macierzystych wodorków zalecanych jest więcej metod należy wybrać preferowane

nazwy IUPAC, a w niektórych przypadkach wstępnie wybrane nazwy. Niektóre nazwy zachowane używane są jako preferowane nazwy IUPAC i jako nazwy stosowane w nomenklaturze ogólnej.

P-52.1 Wybór wstępnie wybranych nazw
P-52.2 Wybór preferowanych nazw IUPAC

P-52.1 WYBÓR WSTĘPNIE WYBRANYCH NAZW

P-52.1.1 Nazwy mononuklearnych macierzystych wodorków podano w P-21.1.1. Fosfan, PH_3, arsan, AsH_3, styban, SbH_3 i bizmutan BiH_3 są wstępnie wybranymi nazwami; odpowiednio nazwy fosfina, arsyna, stybina i bizmutyna, odpowiednio, są zachowane dla stosowania w nomenklaturze ogólnej.

P-52.1.2 Wstępnie wybrane nazwy homogenicznych acyklicznych macierzystych wodorków opisano w P-21.2.2. Wybraną nazwą dla NH_2-NH_2 jest zachowana nazwa hydrazyna; nazwa systematyczna diazan może być użyta w nomenklaturze ogólnej.

P-52.1.3 Wstępnie wybrane nazwy heterogenicznych acyklicznych wodorków macierzystych zawierające przemienne ‘ab’ atomy to jest [a(ba)$_n$ macierzystych wodorków], za wyjątkiem gdy ‘b’ jest węglem lub azotem, są opisane w P-21.2.3.1.

W tych zaleceniach charakterystyczną grupę ‘amina’ w macierzystych wodorkach uważa się za a(ba)n macierzysty wodorek co jest zmianą w stosunku do poprzednich zaleceń, gdzie nie była uznawana. Ponadto, węgiel nie był wyłączony jako pierwiastek ‘b’ co prowadziło do konfliktów z porządkiem starszeństwa heteranów.

Przykłady:

SnH_3-O- SnH_2-O- SnH_3

tristannoksan (wstępnie wybrana nazwa)
[nie (distannyloksy)stannan]

HSe-S-Se-S-SeH

triselanatian (wstępnie wybrana nazwa)

CH_3-NH-CH_3

N-metylometanoamina (PIN)
(nie dikarbazan)

SiH_3-NH-SiH_2-NH-SiH_3

N,*N*-disililosilanodiamina (oparta na silano, wstępnie wybranej nazwie)
(nie trisilazan)

P-52.1.4 Wstępnie wybrane nazwy macierzystych wodorków z niestandardowymi wiązalnościami są omawiane w P-21.1.2.1.

Przykłady:

PH_5

λ^5-fosfan (nazwa wstępnie wybrana)
fosforan

AsH_5

λ^5-arsan (nazwa wstępnie wybrana)
arsoran

SH_4
λ^4-sulfan (nazwa wstępnie wybrana)
(nie sulfuran)

SH_6
λ^6-sulfan (nazwa wstępnie wybrana)
(nie persulfuran)

IH_3
λ^3-jodan (nazwa wstępnie wybrana)
(nie jodynan)

IH_5
λ^5-jodan (nazwa wstępnie wybrana)
(nie perjodynan)

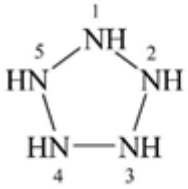
SbH_5
λ^5-styban (nazwa wstępnie wybrana)
styboran

$^{1}SH\text{-}^{2}SH_2\text{-}^{3}SH$
$2\lambda^4$-trisulfan (nazwa wstępnie wybrana)

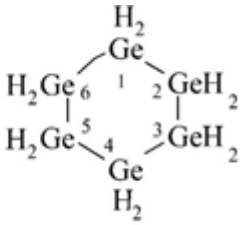
P-52.1.5 Heteromonocykliczne nie węglowe macierzyste wodorki Hantzscha-Widmana

P-52.1.5.1 Wstępnie wybrane nazwy homogenicznych heteromonocyklicznych macierzystych wodorków o dziesięciu lub mniej członach pierścienia są nazwami Hantzscha-Widmana (Patrz P-22.2.2). Wstępnie wybranymi nazwami homogenicznych jednopierścieniowych heterocyklicznych macierzystych wodorków o pierścieniach większych niż dziesięcioczłonowe (patrz P-22.2.3) są nazwy zamienne (‘a’) szkieletu. Nazwy alternatywne, które mogą być użyte w nomenklaturze ogólnej, tworzy się z użyciem przedrostka ‘cyklo’(patrz P-22.2.5).

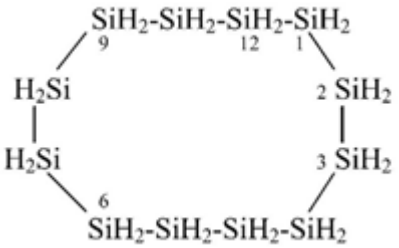
Przykłady:



pentazolidyna (nazwa wstępnie wybrana)
cyklopentaazan
pentazolan



heksagerminan (nazwa wstępnie wybrana)
cykloheksagermanan

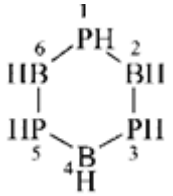


dodekasilacyklododekan (wstępnie wybrana nazwa; patrz P-12.2)
cylododekasilan

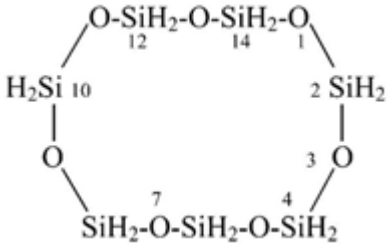
P-52.1.5.2 Heterogeniczne heteromonocykliczne macierzyste wodorki z przemiennymi heteroatomami

Wstępnie wybrane nazwy homogenicznych heteromonocyklicznych macierzystych wodorków o dziesięciu lub mniej członach pierścienia i zawierających przemienne heteroatomy, to jest $[aba]_n$ są nazwami Hantzscha-Widmana (Patrz P-22.2.2). Wstępnie wybranymi nazwami homogenicznych heteromonocyklicznych macierzystych wodorków o pierścieniach więcej niż dziesięcioczłonowe (patrz P-22.2.3) są nazwy zamienne (‘a’) szkieletu. Nazwy alternatywne, które mogą być użyte w nomenklaturze ogólnej, tworzy się z użyciem przedrostka ‘cyklo’(patrz P-22.2.5).

Przykłady:



1,3,5,2,4,6-trifosfatriborynan (nazwa wstępnie wybrana)
cyklotriborafosfan

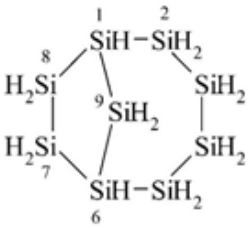


1,3,5,7,9,11,13-heptaoksa-2,4,6,8,10,12,14-heptasilacyklotetradekan (nazwa wstępnie wybrana)
cykloheptasiloksan

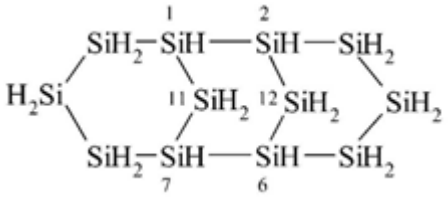
P-52.1.6 Heterocykliczne nie węglowe związki von Baeyera i spiro

P-52.1.6.1 Wstępnie wybrane nazwy związków von Baeyera i związków spiro mających tylko monocykliczne składniki zawierające wyłącznie heteroatomy tego samego rodzaju są nazwami tworzonymi z dodaniem odpowiedniego przedrostka, takiego jak ‘bicyklo’, ‘spiro’itp. i deskryptora zamkniętego nawiasami kwadratowymi, po których następuje przedrostek liczbowy określający całkowitą liczbę heteroatomów, i nazwa monocyklicznego macierzystego wodorku. Nazwy alternatywne używane w nomenklaturze ogólnej się tworzy się według nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu (patrz P-23.4 i P-24.2.4.2)

Przykłady:



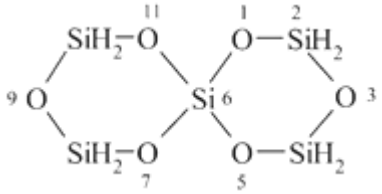
bicyklo[4.2.1]nonasilan (nazwa wstępnie wybrana)
nonasilabicyklo[4.2.1]nonan



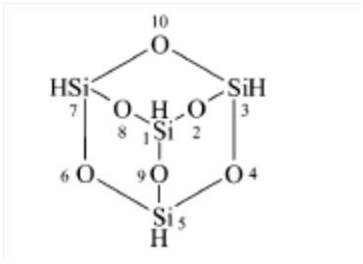
tricyklo[5.3.1.1^{2,6}]dodekasilan (nazwa wstępnie wybrana)
dodekasilatricyklo[5.3.1.1^{2,6}]dodekan

P-52.1.6.2 Wstępnie wybrane nazwy związków von Baeyera i związków spiro mających tylko monocykliczne składniki i zawierających przemienne heteroatomy, tj. $[ab]_n$ tworzy się dodając odpowiedni przedrostek, taki jak ‘bicyklo’, ‘spiro’itp. i deskryptora zamkniętego nawiasami kwadratowymi, po którym następuje człon ‘a’ heteroatomów, nazwa zamienna szkieletu heteroatomu ‘a’ i nazwa zamienna szkieletu heteroatomu ‘b’ (patrz P.24.2.4.3); alternatywne nazwy używane w nomenklaturze ogólnej tworzy się za pomocą nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu.

Przykłady:



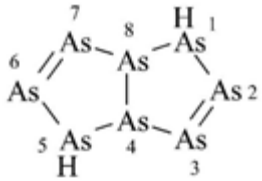
spiro[5,5]pentasiloksan (wstępnie wybrana nazwa)
1,3,5,9,11-heksaoksa-2,4,6,8,10-pentasilaspiro[5,5]undekan



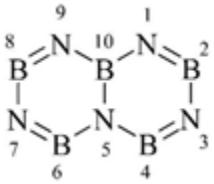
tricyklo[3.3.1.1^{3,7}]tetrasiloksan (nazwa wstępnie wybrana)
2,4,6,8,9,10-heksaoksa-1,3,5,7-tetrasilaadamantan
2,4,6,8,9,10-heksaoksa-1,3,5,7-tetrasilabicyklo[3.3.1.1^{3,7}]dekan

P-52.1.7 Wstępnie wybrane nazwy homogenicznych i heterogenicznych heterobi- i heteropolicyklicznych skondensowanych układ pierścieni tworzy się z użyciem zasad nomenklatury skondensowanej (patrz P-25.3.2.4). Nazwy alternatywne dla użycia w nomenklaturze ogólnej tworzy się dodając odpowiednie przedrostki ‘a’ na początku nazwy skondensowanego układu węglowodorowego.

Przykłady:



1*H*,5*H*-pentaarsolopentaarsol (wstępnie wybrana nazwa)
1*H*,5*H*-oktaarsapentalen



[1,3,5,2,4,6]triazatriborynino[1,2-*a*][1,3,5,2,4,6]triazatriborynin (wstępnie wybrana nazwa)
1,3,4a,6,8-pentaaza-2,4,5,7,8a-pentaboranaftalen

P-52.2 WYBÓR PREFEROWANYCH NAZW IUPAC

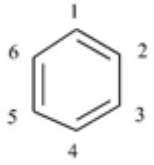
P-52.2.1 Węglowodory acykliczne i monocykliczne
P-52.2.2 Związki heteroacykliczne i monocykliczne związki heterocykliczne
P-52.2.3 Nienasycone związki heterocykliczne z pierścieniami większymi od dziesięcioczłonowych
P-52.2.4 Preferowane nazwy IUPAC w nomenklaturze skondensowanej
P-52.2.5 Preferowane nazwy IUPAC w nomenklaturze fanów
P-52.2.6 Wybór preferowanych nazw IUPAC dla (C_{60}-I_h)[5,6]fullerenu i (C_{70}-$D_{5h(6)}$)[5,6]fullerenu modyfikowanych przedrostkami ‘nor’ lub ‘seko’
P-52.2.7 Preferowane nazwy IUPAC i numeracja układów pierścieni
P-52.2.8 Wybór pomiędzy pierścieniem i łańcuchem jako wodorkiem macierzystym

P-52.2.1 Węglowodory acykliczne i monocykliczne

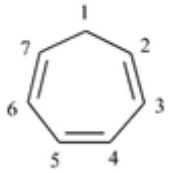
P-52.2.1 Nazwy metan, etan, propan, butan są używane jako preferowane nazwy IUPAC odpowiednio dla CH_4, CH_3-CH_3, CH_3-CH_2-CH_3 i CH_3-CH_2-CH_2-CH_3. Acetylen jest preferowaną nazwą IUPAC dla HC≡CH, ale podstawienie nie jest dozwolone. Ograniczone podstawienie jest dozwolone w nomenklaturze ogólnej, patrz P-15.1.8.2.2.

P-52.2.1.2 W preferowanych nazwach IUPAC w nomenklaturze skondensowanej używa się nazwy [*n*]annulen jako macierzystego składnika (patrz P-25.3.2.1.1) i nazwa ta może być użyta w nomenklaturze ogólnej jako nazwa jednopierścieniowego węglowodoru. Preferowane nazwy IUPAC dla cykloalkenów i cykloalkapolienów tworzy się z nazw odpowiednich cykloalkanów (patrz P-32.1.3.1).

Przykłady:



benzen (PIN)
(nie [6]annulen)



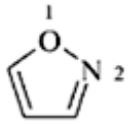
cyklohepta-1,3,5-trien (PIN)
1*H*-[7]annulen (preferowana nazwa IUPAC dla macierzystego składnika w nomenklaturze skondensowanej (patrz P.25.3.2.1.1)

P-52.2.2 Związki heteroacykliczne i heteromonocykliczne

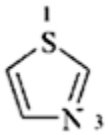
P-52.2.2.1 Formazan jest preferowaną nazwą dla HN=N-CH=N-NH_2. Hydrazyna jest preferowaną nazwą dla H_2N-NH_2.

P-52.2.2.2 Preferowanymi nazwami IUPAC dla związków heteromonocyklicznych o pierścieniach nie większych niż dziesięcioczłonowe są nazwy Hantzscha-Widmana, z włączeniem lokantów ‘1,2’ i ‘1,3’. Zachowane nazwy ‘oksazol’, 'izoksazol’, ‘tiazol’ i ‘izotiazol’ są dozwolone w nomenklaturze ogólnej.

Przykłady:



1,2-oksazol (PIN)
izoksazol

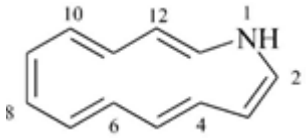


1,3-tiazol (PIN)
tiazol

P-52.2.3 Nienasycone związki heteromonocykliczne o pierścieniach większych niż dziesięcioczłonowe

Preferowane nazwy IUPAC nienasyconych związków monocyklicznych o pierścieniach większych niż dziesięcioczłonowe pochodzą od cykloalkanów i modyfikuje się je stosując nomenklaturę zamienną ‘a’ szkieletu i zamieniając końcówki ‘an’ w nazwie nasyconego związku monocyklicznego na ‘en’, ‘adien’, etc (patrz P-31.1.1). Nazwę [*n*]annulen można użyć (patrz P-31.1.3.2) w nomenklaturze ogólnej dla samego związku heteromonocyklicznego ; jednakże, nazwa ta nie może być użyta do określania tych związków heterocyklicznych jako składników w nomenklaturze skondensowanej.

Przykład:



1-azacyklotrideka-2,4,6,8,10,12-heksaen (PIN)
1-azacyklotridecyn [preferowana nazwa IUPAC głównego składnika w nazwie skondensowanej (patrz także P.25.2.2.1.2.) i 1-azacyklotridecyno jako składnik dołączony (patrz P-25.3.2.2.2)]
1*H*-1-aza[13]annulen

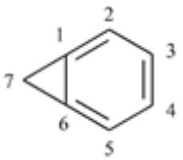
P-52.2.4 Preferowane nazwy IUPAC w nomenklaturze skondensowanej

P-52.2.4.1 Wymóg pięcioczłonowego pierścienia

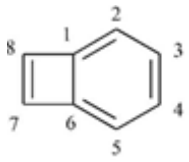
Nomenklatura skondensowana umożliwia tworzenie nazw wyłącznie dla związków mających co najmniej dwa pięcioczłonowe pierścienie. Ten wymóg nie jest konieczny w nomenklaturze ogólnej, w której mogą być użyte nazwy takie jak cyklopropabenzen i cyklobutabenzen. Gdy nazwy skondensowane nie są dozwolone, preferowane nazwy IUPAC oparte są na systemie nienasyconego pierścienia von Baeyera (patrz P-31.1.4.2).

> Jest to zmiana względem zaleceń zawartych w publikacji z 1999 roku o nomenklaturze pierścieni skondensowanych (patrz FR-0, lit.4) i w przewodniku z 1993 (lit. 2) gdzie nie było żadnych ograniczeń wymiaru dwóch pierścieni, które mogłyby występować w układzie skondensowanym. Dla preferowanych nazw IUPAC nazwa skondensowana może być użyta tylko wtedy kiedy obecne są co najmniej dwa pięcio- lub więcej członowe pierścienie; jest to zgodne z zaleceniami z roku 1979 (lit. 1). W nomenklaturze ogólnej nie ma żadnych ograniczeń wymiaru pierścieni w układzie skondensowanym.

Przykłady:



bicyklo[4.1.0]hepta-1,3,5-trien (PIN)
1H-cyklopropabenzen



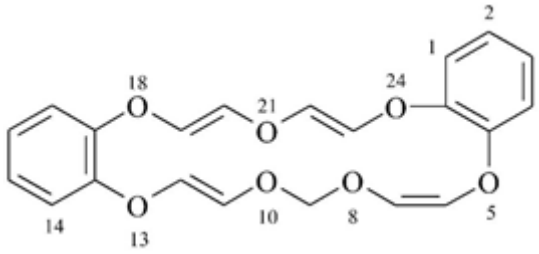
bicyklo[4.2.0]okta-1,3,5,7-tetraen (PIN)
cyklobutabenzen

P-52.2.4.2 Heterocykle jako składniki nazw skondensowanych

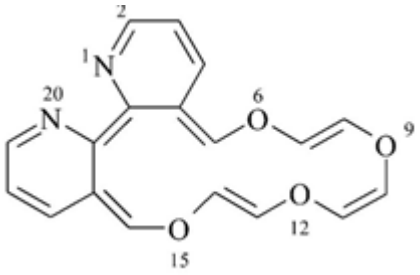
Heterocykle mające pierścienie większe niż dziesięcioczłonowe i maksymalną liczbę nieskumulowanych wiązań podwójnych, których nazwy są oznaczane końcówką ‘yn’, opisane w P-22.2.4, występują w preferowanych nazwach skondensowanych IUPAC zarówno jako składniki macierzyste, jak i składniki dokondensowane. Do tworzenia nazw skondensowanych związków

heterocyklicznych nie zaleca się nazwy ‘annulen’ modyfikowanej przy użyciu nomenklatury zamiennej ‘a’ szkieletu (patrz P-52.2.3)

Przykłady:



dibenzo[*g*,*p*][1,3,6,9,12,15,18]heptaoksacykloikozyn (PIN; patrz P-25.3.6.1)

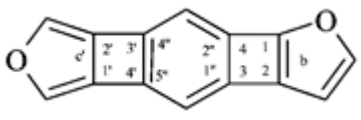


[1,4,7,10]tetraoksacykloheksadecyno[13,12-*b*:14,15-*b'*]dipirydyna (PIN; patrz P-25.3.7.1)

P-52.2.4.3 Wielomacierzyste układy pierścieni skondensowanych z dwoma lub więcej składnikami wewnątrz macierzystymi.

Kiedy dwa (lub więcej) możliwe macierzyste składniki są rozdzielone nieparzystą liczbą międzymacierzystych składników uporządkowanych symetrycznie względem ich składowych pierścieni (ale niekoniecznie z ich lokantami skondensowania) cały układ traktuje się jako wielomacierzysty. W P-25.3.7.3 drugo- i wyżej rzędowe międzymacierzyste składniki nazywa się z zastosowaniem przedrostów zwielokrotniających ‘di’, ‘tri’ itp. lub ‘bis’, ‘tris’ itp. Międzymacierzystym składnikom przypisuje się odpowiednie lokanty, nieprimowane i primowane dla składników pierwszego rzędu, podwójnie primowane dla składników drugiego rzędu, potrójnie primowane dla składników trzeciego rzędu itd.

Przykład:

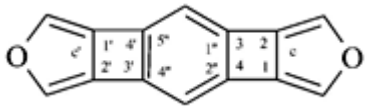


benzo[1′′,2′′:3,4;4′′,5′′:3′,4′]dicyklobuta[1,2-*b*:1′,2′-*c*']difuran (PIN)

Kiedy symetria cząsteczki pozwala grupować składniki międzymacierzyste i macierzyste, takie zgrupowania można wskazywać przedrostkami ‘bis’, ‘tris’ itp. ze wskazaniem grup,

zamkniętych w nawiasach. Przy takim grupowaniu używa się tylko nieprimowanych lokantów. Metoda ta jest często spotykana i może być użyta w nomenklaturze ogólnej.

Przykład:



benzo[1′′,2′′:3,4;4′′,5′′:3′,4']dicyklobuta[1,2-*c*:1′,2′-*c*']difuran (PIN)
benzo[1′′,2′′:3,4;4′′,5′′:3′,4′]bis(cyklobuta[1,2-*c*]furan)

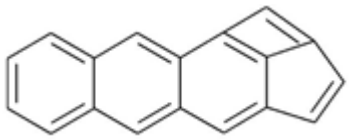
P-52.2.4.4 Ograniczenia nomenklatury skondensowanej

Zasady skondensowania opisane w P-25.1 do P-25.3 stosuje się do par składników. Nie jest natomiast możliwe zastosowania tych zasad do tworzenia nazw układów, w których trzeci składnik jest *orto*- lub *peri*-skondensowany z dwoma składnikami, które same ze sobą są *orto*- lub *orto*- i *peri*-skondensowane. W takiej sytuacji przy tworzeniu preferowanych nazw IUPAC stosowane są następujące procedury:

P-52.2.4.4.1 Wybór mniej preferowanego macierzystego pierścienia lub układu pierścieniowego

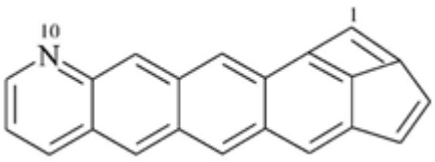
P-52.2.4.4.1.1 Wybór mniej preferowanego pierścienia macierzystego lub układu pierścienia umożliwia utworzenie nazwy skondensowanej. Drugiego i trzeciego wyboru pierścieni macierzystych lub układu pierścieniowego macierzystych składników dokonuje się zgodnie z porządkiem starszeństwa zespołów pierścieni skondensowanych (patrz P-25.3.4).

Przykłady:



cyklobuta[1,7]indeno[5,6-*b*]naftalen (PIN)

Wyjaśnienie: Antracen nie może być wybrany jako najstarszy składnik macierzysty; naftalen, a nie inden, jest następny w porządku starszeństwa przy wyborze składnika macierzystego.



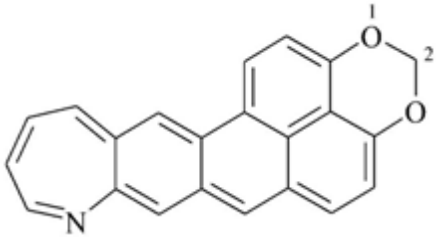
10-azacyklobuta[1,7]indeno[5,6-*b*]antracen (PIN)

Wyjaśnienie: Ani chinolina, ani pirydyna nie mogą być użyte jako najstarszy składnik

macierzysty ponieważ odpowiednio ani naftalen ani antracen nie może być użyty jako starszy przyłączony składnik; tak więc należy użyć nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu (patrz P-25.5.1). Ponieważ preferowany węglowodór tetracen nie może być użyty jako macierzysty węglowodór, do którego można zastosować nomenklaturę zamienną ‘a’ szkieletu (patrz P-52.2.4.4.2) jako macierzysty składnik węglowodorowy wybiera się antracen, następny w porządku starszeństwa.

P-52.2.4.4.1.2. Należy zauważyć, że związki heterocykliczne skondensowane z pierścieniem benzenowym traktuje się jako jeden składnik, co pozwala na tworzenie nazw skondensowanych dla układów pierścieni, których, w oparciu o zasady skondensowania, nie można nazwać w inny sposób.

Przykład:



2H-[1,3]benzodioksyno[6',5',4':10,5,6]antra[2,3-*b*]azepina (PIN)

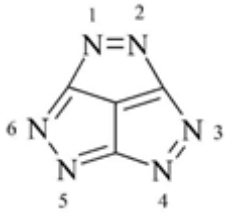
Wyjaśnienie: normalna nazwa skondensowana nie jest możliwa kiedy cztery składniki, azepina, antracen, 1,3dioksyn i benzen traktuje się indywidualnie, dlatego konieczne jest użycie składnika o nazwie ‘benzo’; 1-benzoazepina nie może być macierzystym pierścieniem gdyż wymagało by to rozerwania przyłączonego składnika mającego zachowaną nazwę ‘antra’ co nie jest dozwolone (patrz P-25.3.5).

P-52.2.4.4.2 Nomenklatura zamienna (‘a’) szkieletu

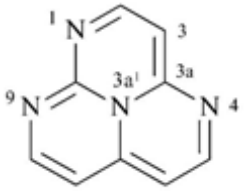
Kiedy mają zastosowanie zasady kondensacji dyskutowane w P-25.1 do P-25.3, nie zaleca się żadnej nazwy zamiennej (‘a’) szkieletu. Taka procedura jest uprawniona tylko w przypadkach opisanych poniżej w P-52.2.4.4.2.1.

P-52.2.4.4.2.1 Jeżeli odpowiedni układ skondensowanych pierścieni węglowodorowych może być nazwany w oparciu o zasady skondensowania lub ma nazwę zachowaną, to wówczas heteroatomy identyfikuje się za pomocą nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu z użyciem odpowiednich przedrostków ‘a’.

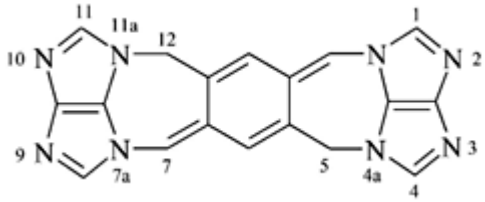
Przykłady:



1,2,3,4,5,6-heksaazacyklopenta[*cd*]pentalen (PIN)



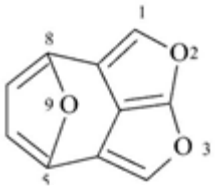
1,3a^{1},4,9-tetraazafenalen (PIN)



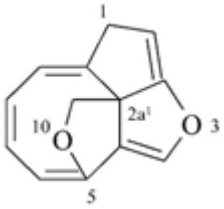
5*H*,12*H*-2,3,4a,7a,9,10,11a,14a-oktaazadicyklopenta[*ij*:*i'j'*]benzo[1,2-*f*:4,5-*f*]diazulen (PIN)

P-52.2.4.4.2.2 Jeżeli układ pierścieni skondensowanych można nazwać tylko przy zastosowaniu nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu, to heteroatomy w mostkach nazywa się przy użyciu tejże nomenklatury. Określenia zamiany wskazuje się na początku nazwy odpowiedniego układu mostkowego skondensowanych pierścieni węglowodorowych. Alternatywnie, mostek heteroatomowy można nazwać za pomocą odpowiedniego zespolonego lub kompleksowego przedrostka.

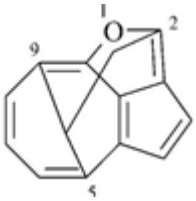
Przykłady:



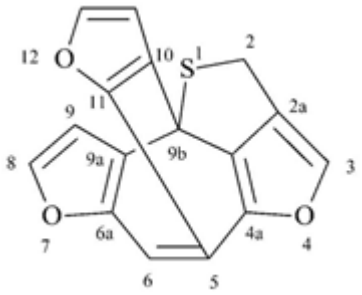
2,3,9-trioksa-5,8-metanocyklopenta[*cd*]azulen (PIN)
5,8-epoksy-2,3-dioksacyklopenta[*cd*]azulen



1*H*-3,10-dioksa-2a^{1},5-etanocyklookta[*cd*]pentalen (PIN)
4*H*-9,2b-(epoksymetano)-2-oksacyklookta[*cd*]pentalen



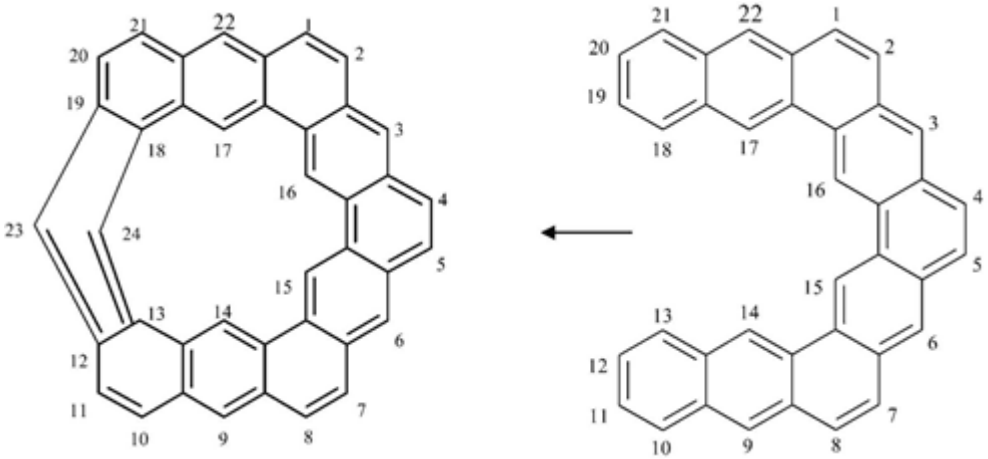
1-oksa-5,9,2-(epietano[1,1,2]triylo)cyklookta[*cd*]pentalen (PIN)
5,9,2-(epietano[1,1,2]triylo)oksacyklookta[*cd*]pentalen



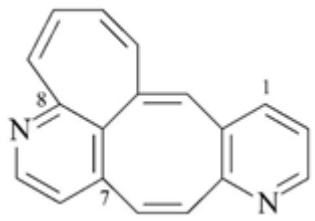
2*H*-4,7,12-trioksa-1-tia-5,9b-[1,2]epicyklopentacyklopenta[2′,3′:6,7]cyklohepta[*cd*]pentalen (PIN)
2*H*-5,9b-[2,3]furano-4,7-dioksa-1-tiacyklopenta[2′,3′:6,7]cyklohepta[*cd*]pentalen

P-52.2.4.4.3 Nomenklatura mostkowania. Do tworzenia nazw dla struktur, które nie mogą być nazwane przy użyciu samej nomenklatury skondensowanej stosuje się mostkowy układ skondensowany (patrz P-25.4). Najpierw tworzy się właściwą nazwę skondensowaną; a następnie dodatkowe pierścienie tworzy się z użyciem mostków.

Przykłady:



12,19:13,18-di(meteno)dinafto[2,3-*a*:2′,3′-*o*]pentafen (PIN)



8,7-(azenoeteno)cyklohepta[4,5]cyklookta[1,2-*b*]pirydyna (PIN)
(nie 6,7-buta[1,3]dienocyklookta[1,2-*b*:5,6-*c*']dipirydyna; część będąca skondensowanym pierścieniem ma maksymalną liczbę atomów

P-52.2.5 Preferowane nazwy IUPAC w nomenklaturze fanów

P-52.2.5.1 Pierścieniowe i linearne struktury fanów opisano w P.26. Aby umożliwić wybranie preferowanych nazw IUPAC pierścieniowe i acykliczne układy fanów definiuje się w następujący sposób:

(1) cyklofany są pierścieniowymi strukturami fanów zawierającymi jeden lub więcej pierścieni lub układów pierścieni, w tym co najmniej jeden pierścień lub układ pierścieni musi być typu ‘mancude’ i być przyłączony do przylegających atomów lub łańcuchów w swoich niesąsiadujących pozycjach;

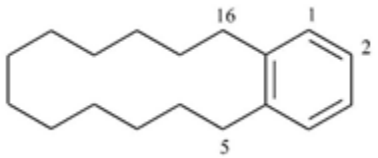
(2) fany linearne zawierają cztery lub więcej pierścieni, z których dwa muszą być terminalne i razem z alicyklicznymi atomami lub łańcuchami muszą tworzyć nie mniej niż siedem węzłów (składników).

P-52.2.5.2 Kiedy warunki określone w **P-52.2.5.1** nie są spełnione, preferowanymi nazwami IUPAC są nazwy układów skondensowanych pierścieni, mostkowych układów skondensowanych i układów von Baeyera. Takie sytuacje zilustrowano w następnych podrozdziałach.

P-52.2.5.2.1 Układy ‘mancude’ przyłączone do sąsiadujących atomów dużego alicyklicznego pierścienia.

Układy ‘mancude’ przyłączone do sąsiadujących atomów alicyklicznego pierścienia są raczej układami skondensowanymi lub skondensowanymi układami mostkowymi. Preferowanymi nazwami IUPAC są nazwy skondensowane opisane w rozdziałach od P-25.0 do P-25.3 lub nazwy mostkowych układów skondensowanych.

Przykłady:

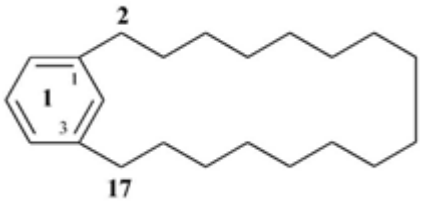


5,6,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16-dodekahydrobenzo[14]annulen

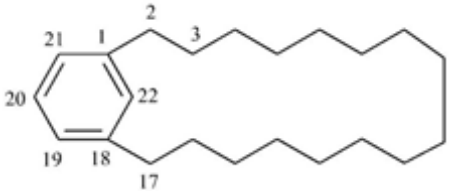
Wyjaśnienie: Nazwa cyklofan jest niedozwolona

Porządek starszeństwa opisany w P-44.2.2.2 dla najważniejszych układów wielopierścieniowych jest następujący: cykliczne układy fanów > układy pierścieni skondensowanych > układy mostkowe skondensowane > układy mostkowe nieskondensowane. Zastosowanie porządku starszeństwa w tworzeniu nazw IUPAC ilustrują poniższe przykłady:

Przykłady:

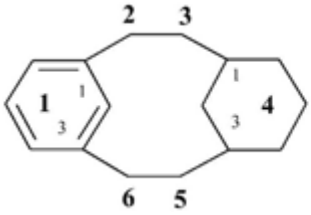


1(1,3)-benzenacykloheptadekafan (PIN; nazwa fanów)

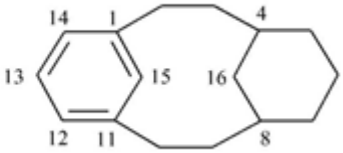


bicyklo[16.3.1]dokoza-1(22),18,20-trien (nazwa von Baeyera)

Wyjaśnienie: Nazwa skondensowana nie jest możliwa, a nazwa fanów jest preferowana względem nazwy von Baeyera.

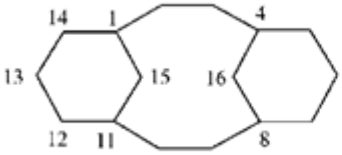


1(1,3)-benzeno-4(1,3)-cyklo-heksanacykloheksafan (PIN, nazwa fanów)

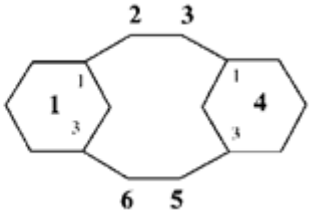


tricyklo[9.3.1.1^{4,8}]heksadeka-1(15),11,13-trien (nazwa von Baeyera)

Wyjaśnienie: Nazwa skondensowana nie jest możliwa, a nazwa fanów jest preferowana względem nazwy von Baeyera.

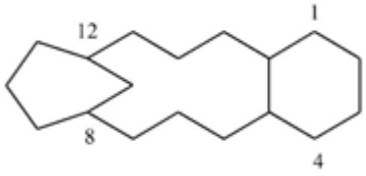


tricyklo[9.3.1.1^{4,8}]heksadekan (PIN, nazwa von Baeyera)

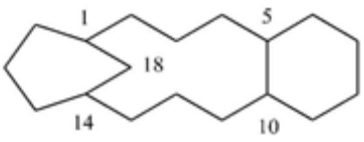


1,4(1,3)-dicykloheksanacykloheksafan (nazwa fanów)

Wyjaśnienie: Nazwa skondensowana nie jest możliwa; nie ma pierścienia ‘mancude’, nazwa fanów nie jest dozwolona, a zatem nazwa von Baeyera jest preferowaną nazwą IUPAC.

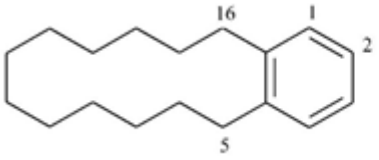


heksadekahydro-1*H*-8,12-metano-benzo[13]annulen (PIN, nazwa skondensowana mostkowego pierścienia)

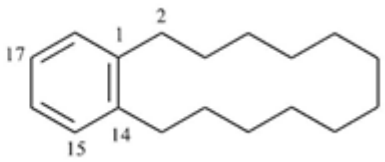


tricyklo[12.3.1.0^{5,10}]oktadekan (nazwa von Baeyera)

Wyjaśnienie: Nazwa fanów nie jest dozwolona bo nie ma pierścienia ‘mancude’; nazwa skondensowana mostkowego pierścienia jest preferowana względem nazwy von Baeyera.

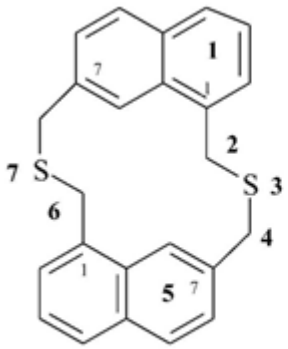


5,6,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16-dodekahydro-benzo[14]annulen (PIN, nazwa skondensowana)

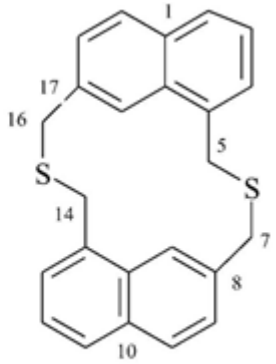


bicyklo[12,4.0]oktadeka-(14),15,17-trien (nazwa von Baeyera)

Wyjaśnienie: Nazwa fanów nie jest dozwolona, patrz Reguła P-52.2.5.1; nazwa skondensowana jest preferowana względem nazwy von Baeyera.



(I)



(II)

(I) 3,7-ditia-1(1,7),5(7,1)-dinaftalenacyklooktafan (PIN, nazwa fanów)

(II) 5,7,14,16-tetrahydro-1,17:8,10-dietenodibenzo[*cj*][1,8]ditiacyklotetradecyn (nazwa skondensowana mostkowego pierścienia)

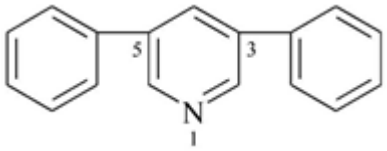
Wyjaśnienie: Nazwa fanów jest starsza względem nazwy skondensowania mostkowego pierścienia.

P-52.2.5.3 Zespoły pierścieni, nazwy linearnych fanów i innych linearnych związków acyklicznych/cyklicznych

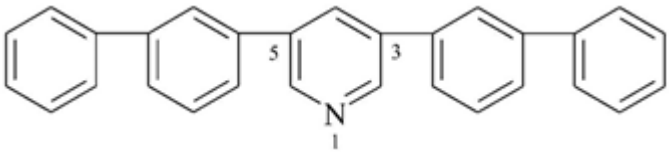
Nomenklatury fanów używa się do tworzenia preferowanych nazw IUPAC dla zespołów pierścieni i linearnych acyklicznych/cyklicznych związków zawierających minimum siedem węzłów, w tym nie mniej niż cztery pierścienie lub układy pierścieni, z których dwa musza być terminalne, nawet gdyby te związki mogły być nazwane za pomocą nomenklatury podstawnikowej lub multiplikacyjnej.

Zalecany jest teraz nowy system numeracji przy tworzeniu preferowanych nazw IUPAC zespołów pierścieni zawierających więcej niż dwa pierścienie lub układy pierścieni; polegający na lokantach złożonych, na przykład, 1^2. Poprzednio używany system lokantów dla zespołów pierścieni zawierających więcej niż dwa pierścienie lub układy pierścieni stosujący kolejno primowane lokanty (lit. 1 i 2) może być użyty w nomenklaturze ogólnej.

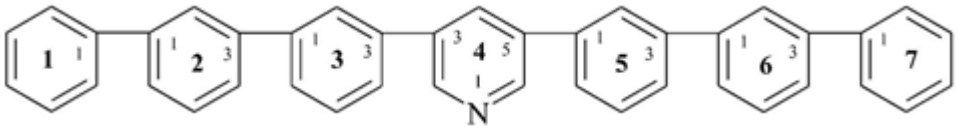
Przykład 1:



3,5-difenylopirydyna (PIN, nazwa podstawnikowa)

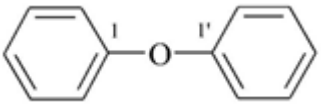


3,5-di([1,1′-bifenyl]-3-ylo)pirydyna (PIN, nazwa podstawnikowa)



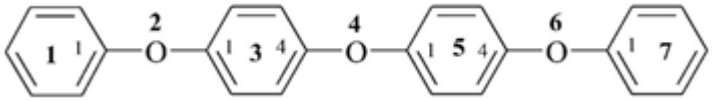
4(3,5)-pirydyna-1,7(1),2,3,5,6(1,3)-heksabenzenaheptafan (PIN nazwa fanów)
3,5-di([1^1,2^1:2^3,3^1-terfenyl]-1^3-ylo)pirydyna (nazwa podstawnikowa, patrz P-28.3.1)
3,5-di([1,1′:3′,1′′-terfenyl]-3-ylo)pirydyna (nazwa podstawnikowa)

Przykład 2:

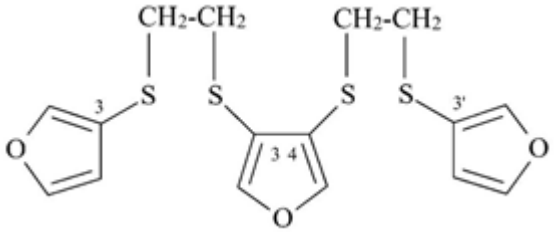


1,1′-oksydibenzen (PIN, nazwa multiplikacyjna)
fenoksybenzen (nazwa podstawnikowa)
(nie eter difenylowy)

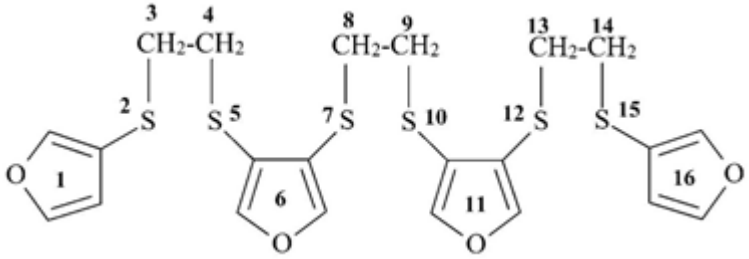
1,1′-[1,4-fenylenobis(oksy)dibenzen (PIN, nazwa multiplikacyjna)
1,4-difenoksybenzen (nazwa podstawnikowa)



2,4,6-trioksa-1,7(1),3,5(1,4)tetrabenzenaheptafan (PIN, nazwa fanów)
1,1′-oksybis(4-fenoksybenzen) (nazwa multiplikacyjna)
1-fenoksy-4-(4-fenoksyfenoksy)benzen (nazwa podstawnikowa)



3,3′-[furano-3,4-diylo(sulfanodiyloetano-2,1-disulfanodiylo)difuran
(PIN, nazwa multiplikacyjna)
3,4-bis{[2-(furan-3-ylosulfanylo)etylo]sulfanylo}furan (nazwa podstawnikowa)



2,5,7,10,12,15-heksatia-1,16(3),6,11(3,4)-tetrafuranaheksadekafan (PIN, nazwa fanów)
3,3′-[etano-1,2-diylobis(sulfanodiylo)bis(4-{[2-(furan-3-ylosulfanylo)etylo]sulfanylo}furan)
(nazwa multiplikacyjna)
3-{[2-(furan-3-ylosulfanylo)etylo]sulfanylo}-4-({-2-[(4-{2-(furan-3-ylosulfanylo)etylo]sulfanylo}furan-3-ylo)sulfanylo]etylo}sulfanylo)furan (nazwa podstawnikowa)

P-52.2.6 Wybór preferowanych nazw IUPAC dla (C_{60}-I_h)[5,6]fullerenu i (C_{70}-$D_{5h(6)}$)[5,6]fullerenu modyfikowanych przedrostkami ‘nor’ lub ‘seko’

P-52.2.6.1 Systematyczne nazwy skondensowanych i mostkowych skondensowanych układów pierścieni dla struktur wywodzących się z niezmodyfikowanych fullerenów w wyniku usunięcia atomów węgla i pierścieni w wyniku operacji ‘nor’, lub w wyniku usunięcia pierścieni przez wycięcie wiązań z zastosowaniem operacji ‘seko’ są często trudne do utworzenia i nawet trudniejsze do rozszyfrowania. Stąd ważnym jest nazwanie fragmentów fullerenu tak, aby pozostawić tak wiele jak to jest możliwe niezmodyfikowanej jego struktury, na której oparta zostanie nazwa. Aby uzyskać zmodyfikowaną nazwę fullerenu fragment fullerenowy musi być wystarczająco duży żeby w dowolny sposób zawierał więcej niż połowę liczby atomów węgla i więcej niż jedną trzecią liczby pierścieni występujących w niezmodyfikowanym fullerenie. Kiedy te dwa warunki są spełnione preferowana nazwa IUPAC jest nazwą tak zmodyfikowanego fullerenu. Jeżeli co najmniej jeden z tych warunków nie jest spełniony, preferowana nazwa IUPAC jest nazwą skondensowanych pierścieni lub nazwą skondensowanych mostkowych pierścieni.

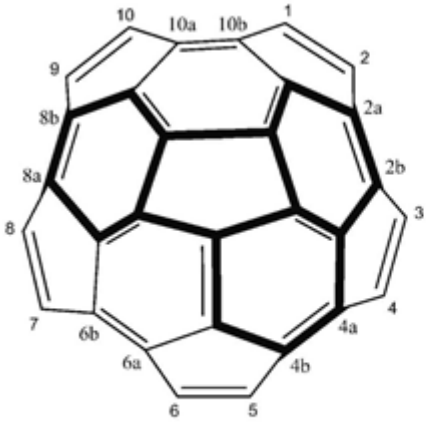
Fragmenty (C_{60}-*I*h)[5,6]fullerenu lub (C_{70}-$D_{5h(6)}$)[5,6]fullerenu otrzymane przez usunięcie atomów węgla lub rozszczepienie wiązań noszą nazwy norfullerenów, sekofullerenów lub seconorfullerenów gdy spełnione są **oba** następujace warunki:

(1) fragment fullerenowy zawiera więcej niż jedną trzecią liczby pierścieni występujących w niezmodyfikowanym fullerenie to jest nie mniej niż **31 i 36 atomów węgla** odpowiednio dla (C_{60}-I_h)[5,6]fullerenu i (C_{70}-$D_{5h(6)}$)[5,6]fullerenu;

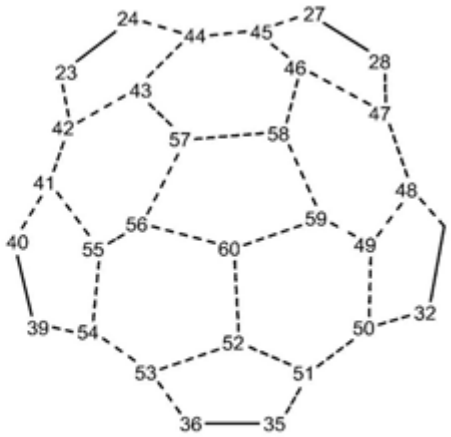
(2) fragment fullerenowy musi zawierać nie mniej niż jedną trzecią pięcio- i/lub sześcioczłonowych pierścieni obecnych w niezmodyfikowanym fullerenie; to jest **11 i 13 pierścieni** odpowiednio dla (C_{60}-I_h)[5,6]fullerenu i (C_{70}-$D_{5h(6)}$)[5,6]fullerenu.

P-52.2.6.2 Nor(C_{60}-I_h)[5,6]fullereny i nor(C_{70}-$D_{5h(6)}$)[5,6]fullereny

Przykład 1: $C_{30}H_{10}$



I



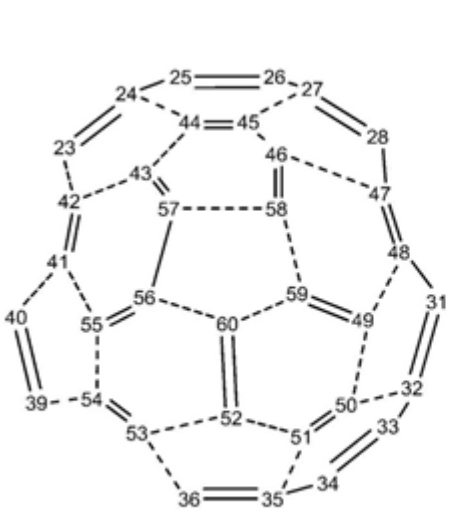
II

cyklopenta[*cd*]di-*as*-indaceno[3,4,5,6-*fghij*:3′,4′,5′,6′-*lmnoa*]fluoranten **(I)** (PIN)

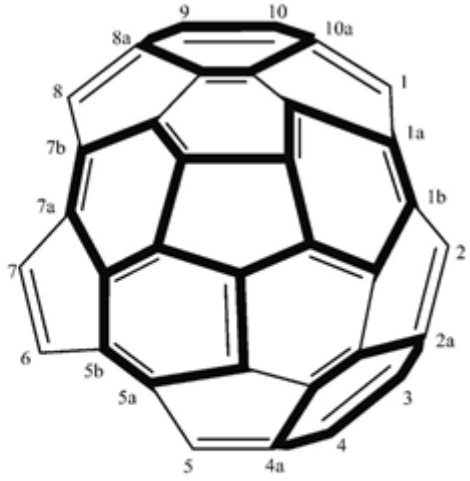
[nie 1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17,18,19,20,21,22,25,26,29,30,33,34,37,38-trikontanor(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren **(II)**

Wyjaśnienie: Preferowana nazwa IUPAC dla tego fragmentu fullerenu jest systematyczną nazwą skondensowaną pierścienia ponieważ zawiera on tylko 30 atomów węgla.

Przykład 2: $C_{34}H_{10}$



I



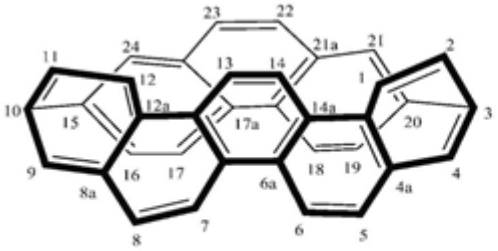
II

1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17,18,19,20,21,22,29,30,37,38-heksakozanor(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren **(I)** (PIN)

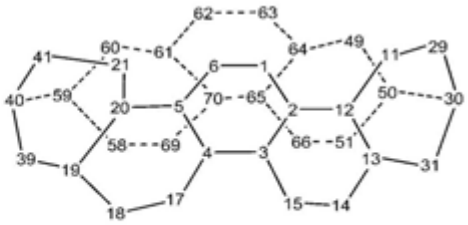
[nie bis(benzo[1,8]-*as*-indaceno[3,4,5,6-*fghij*:3′,4′,5′,6′-*lmnoa*]cyklopenta[*cd*]fluoranten **(II)**

Wyjaśnienie: Preferowaną nazwą IUPAC dla tego fragmentu fullerenu jest nazwa norfullerenu ponieważ zawiera on 34 atomy węgla i 13 pierścieni.

Przykład 3: $C_{36}H_{22}$



I



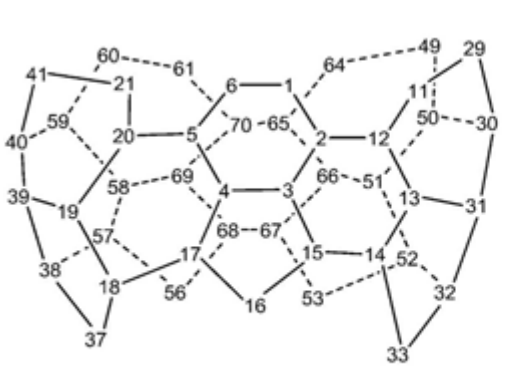
II

3,10-[2,7]epifenantropicen **(I)** (PIN)

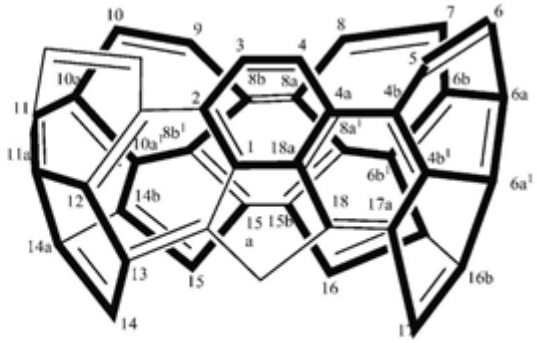
[nie 7,8,9,10,16,22,23,24,25,26,27,28,32,33,34,35,36,37,38,42,43,44,45,46,47,48,52,53,54,=55,56,57,67,68-tetratriakontanor(C_{70}-$D_{5h(6)}$)[5,6]fulleren

Wyjaśnienie: Dla tego fragmentu fullerenu preferowaną nazwą IUPAC jest systematyczna nazwa mostkowego skondensowania pierścieni ponieważ zawiera on tylko osiem pierścieni.

Przykład 4: $C_{45}H_{15}$



I



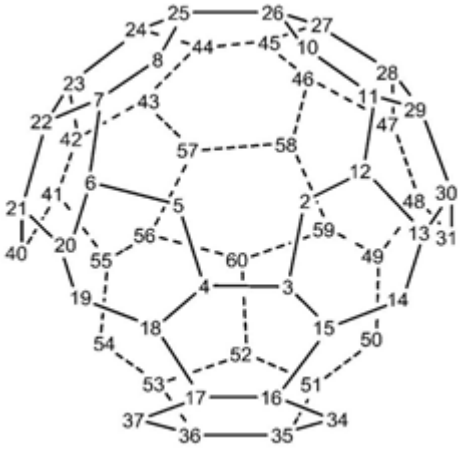
II

7,8,9,10,22,23,24,25,26,27,28,34,35,36,42,43,44,45,46,47,48,54,55,62,63-pentakozanor(C_{70}-$D_{5h(6)}$)[5,6]fulleren (**I**) (PIN)

[nie 16*H*-1,13,18-epieteno[1,2]diyl[1]ylideno)-2,11,12- epiprop[1]eno-[1,3]diyl[3]ylidenoacefenantryleno[4,3-*bc*]tricyklopenta[*n*,*pqr*,*tuv*]picen (**II**)]

Wyjaśnienie: Preferowaną nazwą IUPAC dla tego fullerenu jest nazwa norfullerenu ponieważ ma on 45 atomów węgla i 15 pierścieni.

Przykład 5: $C_{54}H_{12}$

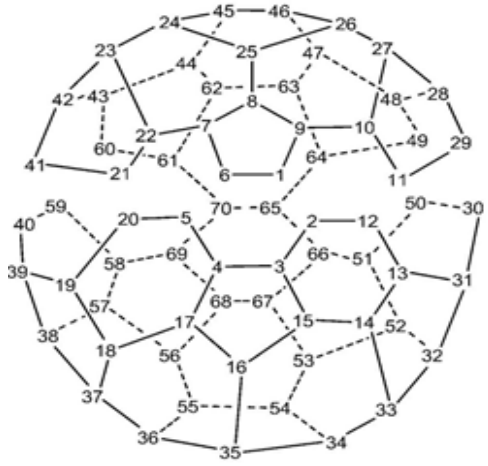


1,9,32,33,38,39-heksanor(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren (PIN)

Wyjaśnienie: Preferowaną nazwą dla tego fragmentu fullerenu jest nazwa norfullerenu ponieważ ma on 54 atomy węgla i 20 pierścieni.

P-52.2.6.3 Seko(C_{60}-I_h)[5,6]fullereny i seko(C_{70}-$D_{5h(6)}$)[5,6]fulleren

Przykład 1: $C_{70}H_{16}$



1,2:5,6:11,12:20,21:29,30:40,41:49,50:59,60-oktaseko(C_{70}-$D_{5h(6)}$)[5,6]fulleren (PIN)

Wyjaśnienie: Preferowaną nazwą IUPAC dla tego fragment fullerenu jest nazwa sekofullerenu ponieważ ma on 70 atomów węgla i 28 pierścieni.

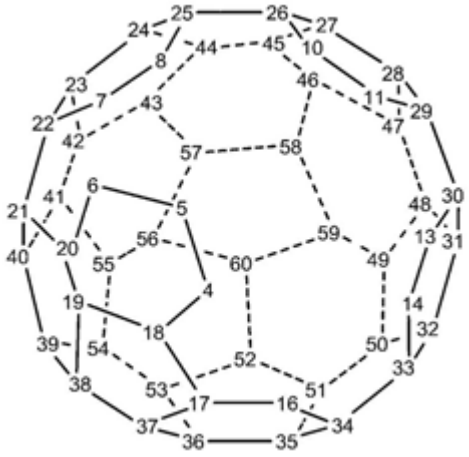
Przykład 2: $C_{60}H_{16}$

1,9:2,12:7,8:13,14:22,23:32,33:41,42:50,5155,56-nonaseko(C_{70}-*I*h)[5,6]fulleren (PIN)

Wyjaśnienie: Preferowaną nazwą IUPAC dla tego fragmentu fullerenu jest nazwa sekofullerenu ponieważ ma on 60 atomów węgla i 21 pierścieni.

P-52.2.6.4 Sekonorfullereny

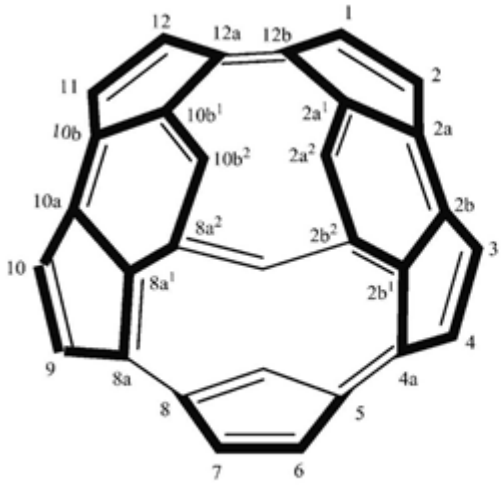
Przykład 1: $C_{54}H_{10}$



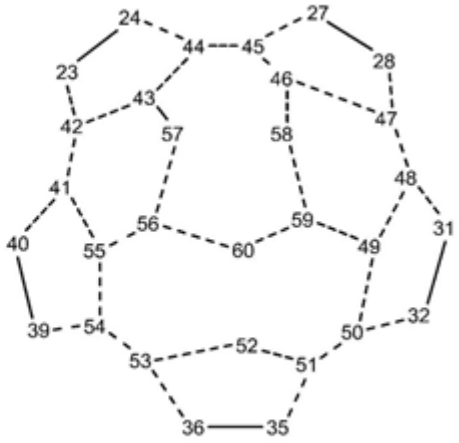
6,7-seko-1,2,3,9,12,15-heksanor(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren (PIN)

Wyjaśnienie: Preferowaną nazwą IUPAC dla tego fragmentu fullerenu jest nazwa sekonorfullerenu ponieważ ma on 54 atomów węgla i 22 pierścienie.

Przykład 2: $C_{30}H_{14}$



(I)



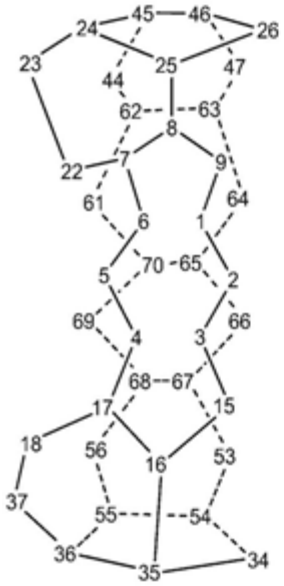
(II)

$2b^2$,$8a^2$:5,8-dimetenocykloheksadeka[1,2,3,4,5,6-*cdefg*:7,8,9,10,11,12-*c'd'e'f'g'*]di-*as*-indacen (I) (PIN)

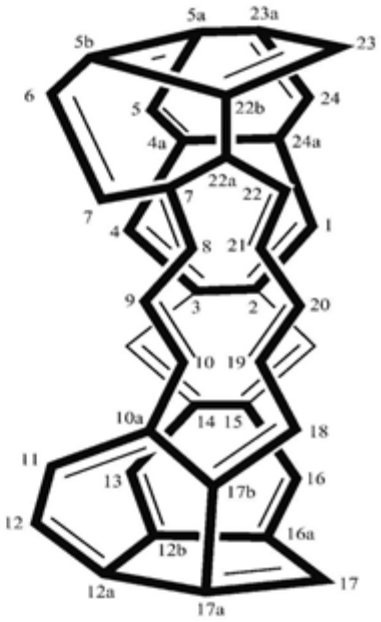
[nie 57,58:52,60-diseko-1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17,18,19,20,21,22,=25,26,29,30,33,34,37,38-triakontanor(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren

Wyjaśnienie: Preferowaną nazwą IUPAC dla tego fragmentu fullerenu jest systematyczną nazwą mostkowego skondensowania pierścieni ponieważ ma on tylko 30 atomów węgla.

Przykład 3: $C_{40}H_{20}$



(I)



(II)

2,15:3,14-dimetenobenzo[*h*]cyklododeka[1,2-*a*:6,7-*a*′]difluoren **(I)** (PIN)

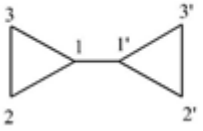
[nie 1,6:3,4-diseko-10,11,12,13,14,19,20,21,27,28,29,30,31,32,33,38,39,40,41,42,43,48,=49,50,51,52,57,58,59,60-triakontanor(C_{70}-$D_{5h(6)}$)[5,6]fulleren **(II)**]

Wyjaśnienie: Preferowana nazwa IUPAC tego fragmentu fullerenu jest systematyczną nazwą skondensowaną pierścieni ponieważ zawiera on 40 atomów węgla ale tylko osiem pierścieni pięcio- i sześcioczłonowych.

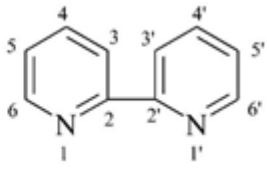
P-52.2.7 Preferowane nazwy IUPAC i numerowanie zespołów pierścieni

P-52.2.7.1 Dla zespołów dwóch lub więcej układów pierścieni połączonych pojedynczym wiązaniem preferowane nazwy IUPAC tworzy się raczej z wykorzystaniem nazw macierzystych wodorków a nie nazw podstawników, za wyjątkiem zespołów bifenylowych i polifenylowych, dla których nigdy nie używa się nazwy benzen. W zespołach dwuskładnikowych, lokanty jednego z pierścieni nie są primowane; lokanty drugiego pieścienia są primowane. W preferowanych nazwach IUPAC lokanty 1 i 1′ są konieczne aby wskazać punkty przyłączenia pierścieni lub układów pierścieni (patrz P-28.2.1)

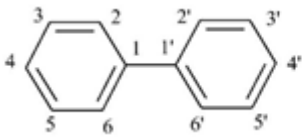
Przykłady:



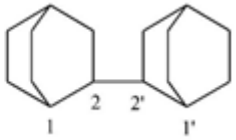
1,1′-bi(cyklopropan) (PIN)
1,1′-bi(cyklopropyl)



2,2′-bipirydyna (PIN)
2,2′-bipirydyl



1,1-bifenyl (PIN)
bifenyl

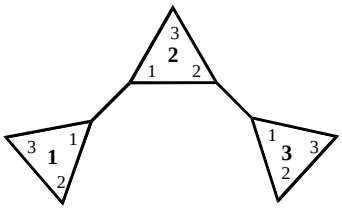


2,2′-bi(bicyklo[2.2.2]oktan) (PIN)
2,2′-bi(bicyklo[2,2,2]oktan-2-yl)

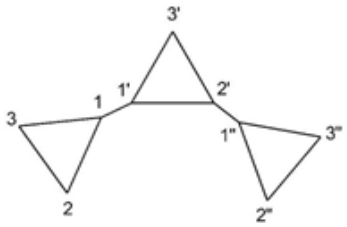
P-52.2.7.2 W preferowanej numeracji dla zbiorów pierścieni zawierających trzy lub więcej identycznych jednostek stosuje się raczej lokanty złożone zamiast primowanych (patrz P-28.3.1).

Rekomendowany jest teraz nowy system numeracji dla preferowanych nazw IUPAC zespołów z więcej niż dwoma pierścieniami lub układami pierścieni; zawiera on lokanty złożone np., 1^2. System używany poprzednio dla zespołów z więcej niż dwoma pieścieniami lub układami pierścieni stosujący seryjnie primowane lokanty (lit. 1 i 2) może być użyty w nomenklaturze ogólnej.

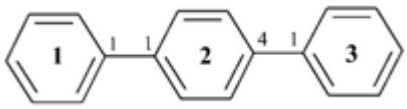
Przykłady:



$1^1,2^1:2^2,3^1$-tercyklopropan (PIN)



1,1′:2′,1′′-tercyklopropan



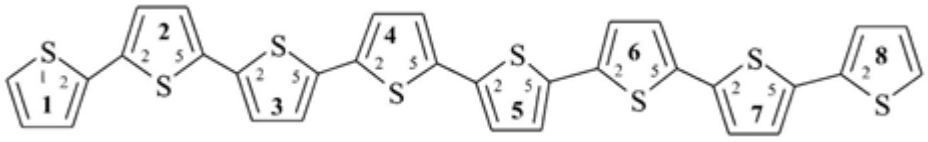
$1^1,2^1:2^4,3^1$-terfenyl (PIN)
1,1′:4′,4′′-terfenyl
(nie *p*-terfenyl)

P-52.2.7.3 Preferowane nazwy IUPAC dla zespołów zawierających siedem i więcej niż siedem pierścieni lub układów pierścieni.

Dla zespołów zawierających siedem i więcej pierścieni lub układów pierścieni preferowanymi nazwami IUPAC są raczej nazwy fanów niż nazwy zespołów pierścieni.

Przykłady:

1,7(1),2,3,4,5,6(1,4)-heptabenzenaheptafan (PIN)
$1^1,2^1:2^4,3^1:3^4,4^1:4^4,5^1:5^4,6^1;6^4,7^1$-septifenyl
1,1':4',1":4",1"':4"'1"":4"",1""':4""',1"""-septifenyl

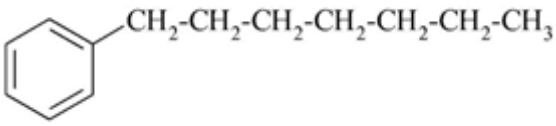


1,8(2),2,3,4,5,6,7(2,5)-heptatiofenooktafan (PIN)
$1^{2},2^{2}:2^{5},3^{2},:3^{5},4^{2}:4^{5},5^{2}:5^{5},6^{2}:6^{5},7^{2}:7^{5},8^{2}$-oktytiofen
2,2':5',2'':5'',2''':5''',2'''':5'''',2''''':5''''',2'''''':5''''',2''''''-oktytiofen

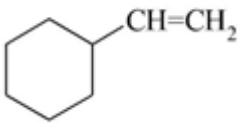
P-52.2.8 Wybór macierzystego wodorku pomiędzy pierścieniem i łańcuchem

W obrębie klasy tego samego heteroatomu i dla takiej samej liczby wprowadzonych grup charakterystycznych, przy tworzeniu preferowanej nazwy IUPAC jako macierzysty wodorek zawsze wybiera się pierścień. W nomenklaturze ogólnej macierzystym wodorkiem może być zarówno pierścień jak i łańcuch (patrz P-44.1.1.2)

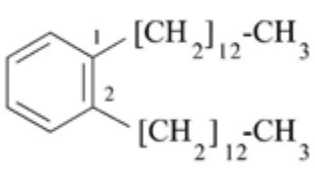
Przykłady:



(a) heptylobenzen (PIN)
(pierścień preferowany względem łańcucha)
(b) 1-fenyloheptan
(łańcuch ma większą liczbę atomów szkieletu)



(a) etenylocykloheksan (PIN)
(pierścień preferowany względem łańcucha)
(b) cykloheksyloeten
(wyraża nienasycenie)



1,2-di(tridecylo)benzen (PIN)
(pierścień preferowany względem łańcucha)
[nie 1,1′-(1,2-fenyleno)di(tridekan); multiplikacja węglowodorów acyklicznych nie jest dozwolona]

P-53 WYBÓR PREFEROWANYCH ZACHOWANYCH NAZW MACIERZYSTYCH WODORKÓW

Zalecane są nadal niektóre z zachowanych nazw macierzystych wodorków. Nazwy metan, etan, propan i butan używa się od początków systematycznej nomenklatury. Nazwy pierścieniowych związków ‘mancude’ pozostawiono jako składniki nomenklatury skondensowanej; są one również używane jako preferowane nazwy IUPAC do nazywania ich pochodnych i w nomenklaturze ogólnej.

Ważnym aspektem tych zachowanych nazw jest ich podstawialność; jako związki macierzyste, przyjmują bez ograniczeń podstawniki wymieniane jako przyrostki i przedrostki. Kilka związków

ma ograniczoną możliwość podstawienia; wśród nich są podstawione benzeny ‘toluen’, ‘ksylen’ i ‘mezytylen’. Obecnie nie zaleca się już niektórych zachowanych nazw, na przykład ‘kumen’ i ‘cymen’.

Preferowane zachowane nazwy IUPAC macierzystych wodorków patrz P-21.1.1 i P-21.1.2 dla acyklicznych wodorków macierzystych, P-22.1 i P-22.2 dla monocyklicznych macierzystych wodorków i P-25.1 i P-25.2 dla policyklicznych wodorków macierzystych.

P-54 WYBÓR PREFEROWANEJ METODY MODYFIKOWANIA STOPNIA HYDROGENACJI

P-54.1 METODY MODYFIKOWANIA STOPNIA HYDROGENACJI MACIERZYSTYCH WODORKÓW

Są trzy metody modyfikowania stopnia hydrogenacji wodorków macierzystych:

(1) zamiana końcówki ‘an’ w acyklicznym wodorku macierzystym na ‘en’ lub ‘yn’

(2) dodanie przedrostka ‘hydro’aby nasycić jedno lub więcej podwójnych wiązań w związkach ‘mancude’;

(3) użycie przedrostka ‘dehydro’do wprowadzenia potrójnego wiązania w związkach ‘mancude’ (patrz P-54.4)

Przy tworzeniu preferowanych nazw IUPAC systematyczne nazwy IUPAC i zachowane nazwy wodorków macierzystych można modyfikować w ten sam lub na różne sposoby .

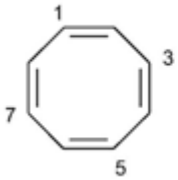
P-54.2 NIENASYCONE ZWIĄZKI MONOKARBOCYKLICZNE

Do modyfikacji stopnia nienasycenia związków monokarbocyklicznych stosuje się dwie metody:

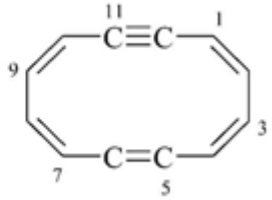
(1) użycie końcówki ‘en’ lub ‘yn’
(2) użycie nazwy macierzystej ‘annulen’

Metodą (1) tworzy się preferowane nazwy IUPAC:

Przykłady:



cyklookta-1,3,5,7-tetraen (PIN)
[8]annulen

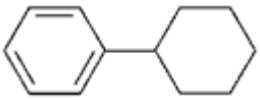


cyklododeka-1,3,5,7,9-pentaen-11-yn (PIN)
1,2-didehydro[12]annulen

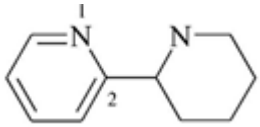
P-54.3 NIENASYCENIE W ZESPOŁACH PIERŚCIENI SKŁADAJĄCYCH SIĘ Z MONOCYKLICZNYCH PIERŚCIENI ‘MANCUDE’ I NASYCONYCH

Kiedy zespoły skądinąd identycznych pierścieni zawierają zarówno pierścienie ‘mancude’ jak i pierścienie nasycone preferuje się użycie przedrostków hydro, z wyjątkiem przypadku zespołu bicyklicznego zawierającego pierścień benzenowy i cykloheksanowy. Jednakże gdy spełnione są wymagania stawiane przy tworzeniu nazw fanów, nazwy fanów są preferowanymi nazwami IUPAC.

Przykłady:



cykloheksylobenzen (PIN)
1,2,3,4,5,6-heksahydro-1,1′-bifenyl



1,2,3,4,5,6-heksahydro-2,2′-bipirydyna (PIN)
2-(piperydyn-2-ylo)pirydyna

1(1),4(1,4)-dibenzena-2,3,5,6(1,4),7(1)-pentacykloheksanaheptafan (PIN)
4-[4-(4'-fenylo[1,1′-bi(cykloheksan)]-4-ylo)fenylo]-1^1,2^1:2^4,3^1-tercykloheksan

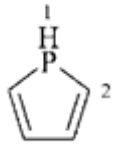
P-54.4 NAZWY MODYFIKOWANE PRZEDROSTKAMI ‘HYDRO’LUB ‘DEHYDRO’

W tych zaleceniach przedrostki ‘hydro’ i ‘dehydro’ uważa się za rozłączne, ale nie umieszcza się ich w alfabetycznej liście przedrostków rozłącznych (patrz P-14.4; patrz także P-15.1.5.2, P-31.2, P-58.2) co jest zmianą względem wcześniejszych zaleceń gdzie były one szeregowane alfabetycznie razem z przedrostkami podstawników. Kiedy wraz z końcówkami ‘en’ i ‘yn’ są użyte do modyfikacji nazw macierzystych wodorków, to podlegają zasadzie najniższych lokantów, zgodnie z numeracją macierzystego wodorku i po priorytecie nadanym wskazanemu atomowi wodoru, dodanemu wskazanemu atomowi wodoru i po przyrostkach, kiedy są obecne, jak omówiono w ogólnych zasadach numeracji (P-14.4).

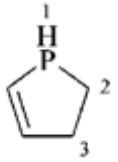
P-54.4.1 Heteromonocykliczne związki Hantzscha-Widmana

Preferowane nazwy IUPAC dla pierścieni Hantzscha-Widmana odpowiadają związkom zarówno w pełni nienasyconym jak i w pełni nasyconym (patrz P-22.2.2.1.1.). Dodanie przedrostków ‘hydro’do nazw w pełni nienasyconych pierścieni Hantzscha-Widmana prowadzi do preferowanych nazw IUPAC, pierścieni częściowo nienasyconych; nazwy zawierające przedrostek ‘dehydro’są dozwolone tylko w nomenklaturze ogólnej.

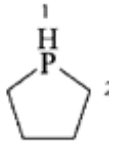
Przykłady:



1*H*-fosfol (PIN)



2,3-dihydro-1*H*-fosfol (PIN)
2,3-didehydrofosfolan

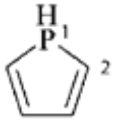


fosfolan (PIN)

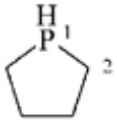
P-54.4.2 Nasycone związki heteromonocykliczne

Preferowane nazwy IUPAC nasyconych związków heteromonocyklicznych są nazwami Hantzscha-Widmana opisanymi w P-22.2.2.1.1 albo nazwami zachowanymi przytoczonymi w Tabeli 2.3. Nazwy wywodzące się od nazw Hantzscha-Widmana z przedrostkami ‘hydro’(patrz P-54.4.1) i z nazw zachowanych z dodaniem maksimum przedrostków ‘hydro’bądź nazw ‘cyklo’opisanych w P-22.2.5, nie są preferowanymi nazwami IUPAC ale mogą być użyte w nomenklaturze ogólnej.

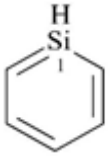
Przykłady:



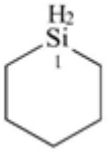
1*H*-fosfol (PIN)



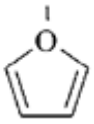
fosfolan (PIN)
2,3,4,5-tetrahydro-1*H*-fosfol



silin (PIN)

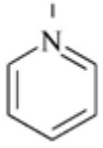


silinan (PIN)
heksahydrosilin

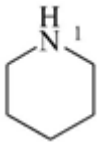


furan (PIN)

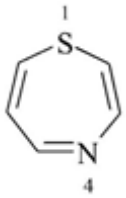
oksolan (PIN)



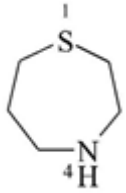
pirydyna (PIN)



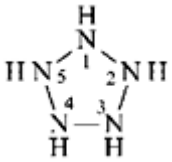
piperydyna (PIN)
heksahydropirydyna



1,4-tiazepin (PIN)



1,4-tiazepan (PIN)
heksahydro-1,4-tiazepin



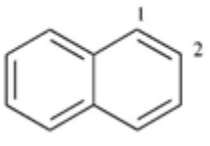
cyklopentaazan
pentazolidyna (wstępnie wybrana nazwa; patrz P-22.2.21.2)
pentazolan

P-54.4.3 Skondensowane układy pierścieni i zespoły monocyklicznych pierścieni ‘mancude’ tworzących skondensowane układy pierścieni

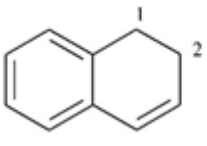
P-54.4.3.1 Dla w pełni nienasyconych związków preferowanymi nazwami IUPAC są zachowane nazwy skondensowane (patrz P-25). Preferowane nazwy IUPAC dla częściowo i całkowicie nasyconych związków tworzy się z użyciem przedrostków ‘hydro’. W ten sam sposób tworzone są preferowane nazwy IUPAC dla zespołów pierścieni częściowo nasyconych i ‘mancude’.

W tych zaleceniach przedrostek ‘hydro’ jest rozłączny, ale nie umieszcza się go w alfabetycznej liście przedrostków rozłącznych (patrz P-14.4; patrz także P-15.1.3.2, P-31.2, P-58.2) co jest zmianą względem wcześniejszych zaleceń (lit. 1, 2) gdzie był on szeregowany alfabetycznie razem z przedrostkami podstawników. Kiedy wraz z końcówkami ‘en’ i ‘yn’ jest użyty do modyfikacji nazwy macierzystych wodorków, to podlega zasadzie najniższych lokantów, zgodnie z numeracją macierzystego wodorku i po priorytecie nadanym wskazanemu atomowi wodoru, dodanemu wskazanemu atomowi wodoru i po przyrostkach, kiedy są obecne, jak wymieniono w ogólnych zasadach numeracji (P-14.4).

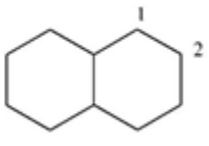
Przykłady:



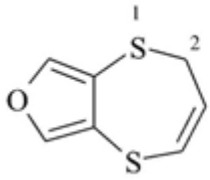
naftalen (PIN)

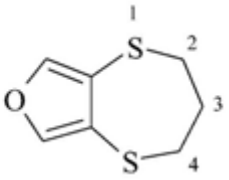


1,2-dihydronaftalen (PIN)

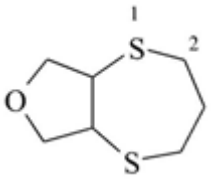


dekahydronaftalen (PIN)

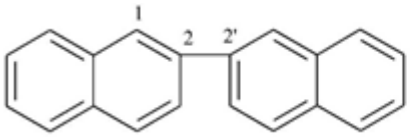


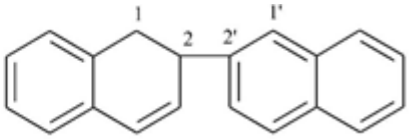


2*H*-[1,4]ditiepino[2,3-*c*]furan (PIN) 3,4-dihydro-2*H*-[1,4]ditiepino[2,3-*c*]furan (PIN)



heksahydro-2*H*-[1,4]ditiepino[2,3-*c*]furan (PIN)



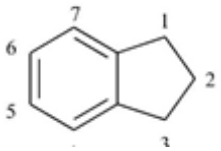


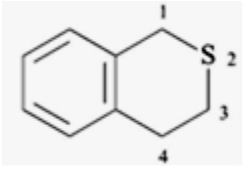
2,2′-binaftalen (PIN)
2,2′-binaftyl

1,2-dihydro-2,2′-binaftalen (PIN)
1,2-dihydro-2,2′-binaftyl
1,2-dihydro-2-(naftalen-2-ylo)naftalen

P-54.4.3.2 Zachowane nazwy niektórych częściowo nasyconych związków heterocyklicznych ‘indan’, ‘indolina’, ‘izoindolina’, ‘chroman’, ‘izochroman’, i ich chalkogenowych analogów nie są używane jako preferowane nazwy IUPAC, ale ich użycie jest akceptowane w nomenklaturze ogólnej (patrz P-31.2.33.1). Preferowane nazwy IUPAC są oparte na zachowanych nazwach ‘mancude’ inden, 1*H*-indol, 1*H*-izoindol, 2*H*-1-benzopiran, 1*H*-2-benzopiran (i ich chalkogenowe analogi), zmodyfikowanych przez dodanie przedrostków ‘hydro’(patrz P-54.4.3.1).

Przykład:





indan
2,3-dihydro-1*H*-inden (PIN)

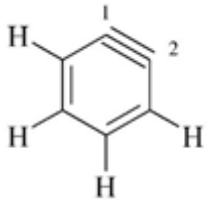
izotiochroman
3,4-dihydro-1*H*-2-benzotiopiran (PIN)

P-54.4.4 Nazwy modyfikowane przedrostkami ‘dehydro’

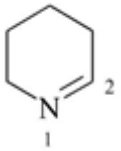
Przedrostków ‘dehydro’używa się przy tworzeniu preferowanych nazw IUPAC odwodornionych związków ‘mancude’. Mogą być one również użyte w nomenklaturze ogólnej do wprowadzania podwójnych i potrójnych wiązań do nasyconych wodorków macierzystych.

W tych zaleceniach przedrostek ‘hydro’ jest rozłączny, ale nie jest umieszczony na alfabetycznej liście przedrostków rozłącznych (patrz P-14.4; patrz także P-15.1.3.2, P-31.2, P-58.2) co jest zmianą względem zaleceń wcześniejszych (lit. 1, 2) gdzie był on szeregowany alfabetycznie razem z przedrostkami podstawników. Kiedy wraz z końcówkami ‘en’i ‘yn’ przedrostek ‘hydro’ jest użyty do modyfikacji nazwy macierzystych wodorków, to podlega zasadzie najniższych lokantów. Następuje to zgodnie z numeracją macierzystego wodorku i priorytetem nadanym wskazanemu atomowi wodoru, dodanemu wskazanemu atomowi wodoru i przyrostkom, o ile są obecne, jak wskazano w ogólnych zasadach numeracji (P-14.4).

Przykład:



1,2-didehydrobenzen (PIN)
cykloheksa-1,3-dien-5-yn
(nie benzyn)



1,2-didehydropiperydyna
2,3,4,5-tetrahydropirydyna

P-55 WYBÓR PREFEROWANYCH ZACHOWANYCH NAZW ZWIĄZKÓW O MACIERZYSTYCH FUNKCJACH

‘Nazwy zachowane’ to nazwy zwyczajowe, które można użyć do nazywaniu związków organicznych. Nazwy zachowane mogą mieć zarówno macierzyste wodorki jak i związki o macierzystych funkcjach. Liczba macierzystych wodorków mających zachowane nazwy przez lata pozostawała prawie niezmieniona. Głównym powodem było to, że nazwy alifatycznych wodorków macierzystych metan, etan, propan i butan były używane od czasu Konwencji Genewskiej. Większość nazw cyklicznych wodorków macierzystych jest wykorzystywana jako składniki w systematycznej nomenklaturze skondensowanej, jak omówiono w P-52. Sytuacja dotycząca związków o macierzystych funkcjach jest odmienna. Ich liczba została znacznie zredukowana w regułach z 1979 r i jeszcze bardziej zmniejszona w zaleceniach z 1993 r. W tych zaleceniach znacznie ograniczono ich stosowanie jako preferowanych nazw IUPAC. Wszystkie nazwy zachowane w 1993 r mogą być stosowane w nomenklaturze ogólnej i specjalistycznej. Wprowadzono zatem dwie odrębne grupy:

(1) Nazwy zachowane wykorzystywane jako preferowane nazwy IUPAC

(2) Nazwy zachowane zalecane w nomenklaturze ogólnej

Dalszą klasyfikację uwzględniającą podstawienie ustalono w zaleceniach z 1993 r. Struktury odpowiadające nazwom zachowanym mogą być podstawiane bez ograniczeń, podstawiane w sposób ograniczony lub wcale nie mogą być podstawiane. Kwestia ta jest omówiona w P-15.1.3.

W kontekście preferowanych nazw IUPAC, nazwy większości wodorków macierzystych o zachowanych nazwach, rekomendowanych jako preferowane nazwy IUPAC, jest w pełni podstawialna i większość związków o macierzystych funkcjach mających nazwy zachowane także zalecanych jako preferowane nazwy IUPAC może być podstawianych, aczkolwiek z ograniczeniami wynikającymi z charakterystyki grupy i starszeństwa klas. Znane są wyjątki, kiedy żadne podstawienie nie jest dozwolone.

Nazw zachowanych zalecanych w nomenklaturze ogólnej i specjalistycznej należy używać tak jak w przeszłości. Reguły dotyczące podstawienia odpowiednich struktur są mniej ścisłe i można nadal stosować tradycyjną nomenklaturę IUPAC w całej jej różnorodności i możliwościach dostosowania. W tej sekcji będą omawiane tylko preferowane nazwy IUPAC.

Organiczne sfunkcjonalizowane związki macierzyste, mające zachowane nazwy wykorzystywane jako preferowane nazwy IUPAC, są wymienione w P-34.1. Podstawienie jest dozwolone we wszystkich strukturach, wyjątkami są anizol i *tert*-butoksyl, kwas mrówkowy i grupa formylowa, podstawialne w ograniczonym zakresie.

Dla nieorganicznych związków macierzystych, patrz P-67.1.2 i P-67.2.1. Organiczne związki o macierzystych funkcjach w nomenklaturze ogólnej patrz P-34.1.3.

P-56 WYBÓR PREFEROWANEGO PRZYROSTKA DLA GŁÓWNEJ GRUPY CHARAKTERYSTYCZNEJ

Przyrostki zawsze uważa się za najbardziej wyjątkowe składniki tworzonych nazw. W przeszłości pozbywano się niektórych przyrostków i zastępowano je nowymi. W tych zaleceniach wprowadzono lub zmodyfikowano następujące przyrostki.

P-56.1 PRZYROSTEK ‘PEROKSOL’, DLA –OOH

Przy tworzeniu podstawnikowych nazw hydroperoksydów zaleca się teraz użycie przyrostka ‘peroksol’. Takie nazwy są preferowane w nomenklaturze klasowo-funkcyjnej.

> Przyrostek ‘peroksol’ dla –OOH jest obecnie stosowany w nazwach hydroperoksydów, które według poprzednich zaleceń nazywano zgodnie z nomenklaturą klasowo-funkcyjną.

Przykład:

CH_3-CH_2-OOH
etanoperoksol (PIN)
hydroperoksyd etylu

P-56.2 PRZYROSTKI ‘*SO*-TIOPEROKSOL’ I ICH ANALOGI CHALKOGENOWE

Przyrostka ‘kwas sulfenowy’ i jego chalkogenowych analogów zaniechano w zaleceniach z 1993 r (lit. 2). W tych zaleceniach zastąpiono je nowymi przyrostkami ‘*SO*- tioperoksol’, ‘*SeO*-

selenoperoksol', '*SS*-ditioperoksol', '*TeS*-tellurotioperoksol', '*SeSe*- diselenoperoksol', '*SeTe*-selenotelluroperoksol' i 'TeSe-telluroselenoperoksol' (patrz P-63.4.2.1).

Przyrostek *SO*-tioperoksol i jego chalkogenowe analogi wprowadzono teraz w celu zastąpienia przyrostka 'kwas sulfenowy' i jego chalkogenowów analogów, zaniechanych w zaleceniach z 1993 r

Przykład:

CH_3-S-OH

metano-*SO*-tioperoksol (PIN)
(nie kwas metanosulfenowy)

C_6H_5-SeSe-H

benzenodiselenoperoksol (PIN)
(nie kwas benzenoselenoselenenowy)

P-56.3 PRZYROSTKI 'IMIDOAMID' I 'KARBOKSYIMIDOAMID'

Przyrostki 'amidyna' i 'karboksyamidyna' dla –C(=NH)-NH_2 i –(C)(=NH)-NH_2 nie są obecnie zalecane. W preferowanych nazwach IUPAC zastąpiono je nowymi przyrostkami funkcyjnymi 'imidoamid' i 'karboksyimidoamid' (patrz P-66.4.1).

Przykłady:

CH_3- C(=NH)-NH_2

etanoimidoamid (PIN)
(już nie acetoamidyna)

C_6H_{11}- C(=NH)-NH_2

cykloheksanokarboksyimidoamid (PIN)
(już nie cykloheksanokarboksyamidyna)

P-56.4 KOŃCÓWKI 'DIYL' I ' YLIDEN' vs. 'YLEN'

Przyrostek 'ylen' stosowany poprzednio do opisania dwuwiązalnych podstawników, w których wolne wartościowości nie tworzą podwójnego wiązania tj. −E− lub E< został usunięty w 1993 r. (lit. 2) z wyjątkiem określeń 'metylen', 'etylen', i 'fenylen'. Podstawniki ,w których wolne wiązalności tworzą wiązanie podwójne czyli E=, opisano przyrostkiem 'yliden'. Przyrostek 'ylen' został zastąpiony przyrostkiem 'diyl' wyrażającym rodzaj wiązania −E− lub E< i 'yliden' dla E=, na przykład odpowiednio etano-1,2-diyl dla –CH_2-CH_2− i etyliden dla H_3C-CH=. Jednakże nazwa 'metyliden' została zachowana dla podstawnika −CH_2− i jest używana w preferowanych nazwach IUPAC częściej niż metanodiyl. CAS nadal stosuje przyrostek 'etylen' do opisywania typów wiązań 'diyl' i 'yliden', zwłaszcza 'metylen' zarówno dla −CH_2− jak i CH_2=.

Przykłady:

−CH_2−

metylen (preferowany przedrostek)
metanodiyl

H_2C=

metyliden (preferowany przedrostek)
(poprzednio metylen)

$-CH_2-CH_2-$ $CH_3-CH=$

etano-1,2-diyl (preferowany przedrostek) etylen — etyliden (preferowany przedrostek)

$-SiH_2-$ $H_2Ge=$

silanodiyl (wstępnie wybrany przedrostek) — germyliden (wstępnie wybrany przedrostek)

$-BH-$ $HB=$

boranodiyl (wstępnie wybrany przyrostek) (nie borylen, nazwa nadal używana przez CAS) — boranyliden (wstępnie wybrany przyrostek) (nie borylen, nazwa nadal używana przez CAS)

$-SbH-$ $HSb=$

stybanodiyl (wstępnie wybrany przedrostek) stybinodiyl (nie stybylen, nazwa nadal używana przez CAS) — stybanyliden (wstępnie wybrany przedrostek) stybinyliden (nie stybylen, nazwa nadal używana przez CAS)

$-NH-CO-NH-$

karbonylobis(azadienyl) [preferowany przedrostek, nazwa stosowana w nomenklaturze multiplikacyjnej); (patrz P-66.1.6.1.1.3)]
(nie karbonylodiimino, nazwa nadal stosowana przez CAS)
(nie ureilen)

P-57 WYBÓR PREFEROWANYCH I WSTĘPNIE WYBRANYCH PRZEDROSTKÓW PODSTAWNIKÓW

Preferowane przyrostki podstawników są rozważane w trzech różnych sekcjach. Ich pełna lista jest przedstawiona w Załączniku 2.

Wszystkie podstawniki nazywa się systematycznie za pomocą nomenklatury podstawnikowej. Niektóre nazwy są zachowane; są one ważne, ponieważ mają pierwszeństwo względem systematycznych nazw podstawników.

P-57.1 Przedrostki podstawników wywodzące się z macierzystych wodorków
P-57.2 Przedrostki wywodzące się z grup charakterystycznych (funkcyjnych) związków
P-57.3 Przedrostki wywodzące się z organicznych związków o macierzystych funkcjach
P-57.4 Tworzenie liniowego zespolonego i/lub złożonych przedrostków podstawników

P-57.1 PRZEDROSTKI PODSTAWNIKÓW WYWODZĄCE SIĘ Z MACIERZYSTYCH WODORKÓW

P-57.1.1 Przedrostki wywodzące się z mononuklearnych i acyklicznych wodorków macierzystych

P-57.1.1.1 Kiedy wolne wiązalności znajdują się w pozycji 1 podstawnika pochodzącego z mononuklearnych wodorków węgla, krzemu, germanu, cyny i ołowiu i od acyklicznych węglowodorów, preferowane przedrostki są ‘typu alkilowego’ zgodnie z P-29.2. Dla wszystkich mononuklearnych wodorków innych niż wymienione powyżej i dla podstawników nasyconych gdzie wolne wartościowości są w innej pozycji niż 1, preferowane przedrostki są ‘typu alkanylowego’

Przykłady:

CH_3- metyl (preferowany przedrostek)
metanyl

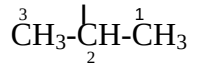
PH_2- fosfanyl (wstępnie wybrany przedrostek)

SiH_3- silil (wstępnie wybrany przedrostek)
silanyl

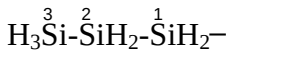
$CH_3-\overset{1}{C}H_2-\overset{1}{C}H=$ propyliden
(preferowany przedrostek)
1-propanyliden

$CH_2=$ metyliden (preferowany przedrostek)
metanyliden

$CH_3-C\equiv$ etyliden (preferowany przedrostek)
etanyliden



propan-2-yl (preferowany przedrostek)
1-metyloetyl
izopropyl



trisilan-1-yl (wstępnie wybrany przedrostek)

P-57.1.1.2 Przedrostek metylen jest zachowany jako przedrostek preferowany z nieograniczonym podstawieniem, z wyjątkiem podstawników mogących tworzyć łańcuch węglowy.

P-57.1.2 **N**astępujące zachowane nazwy preferowanych przedrostków, dla których nie zaleca się żadnego podstawienia:

$-C(CH_3)_3$

tert-butyl (preferowany przedrostek)
1,1-dimetyloetyl

$C_6H_5-CH_2-$

benzyl (preferowany przedrostek)
fenylometyl

$C_6H_5-CH=$

benzyliden (preferowany przedrostek)
fenylometyliden

$C_6H_5-C\equiv$

benzylidyn (preferowany przedrostek)
fenylometylidyn

Wśród preferowanych przedrostków, nazwy ‘benzyn’, ‘benzyliden’ i ‘benzylidyn’ nie mogą być podstawione. Poprzednio, jak podano w Przewodniku z 1993 r (lit. 2) mogły być one podstawione tylko w pierścieniu. Natomiast, w nomenklaturze ogólnej podstawienie jest dozwolone w ograniczonym zakresie (patrz P-29.6.2.1).

P-57.1.3 Zachowane przedrostki zalecane tylko w nomenklaturze ogólnej

Przedrostek ‘etylen’ dla $-H_2C\text{-}CH_2-$ jest zalecany z nieograniczonym podstawieniem tylko w nomenklaturze ogólnej (P-19.6.2.3).

Izopropyl dla $(CH_3)_2CH-$, izopropyliden dla $(CH_3)_2C=$ i trytyl dla $(C_6H_5)_3C-$ są zachowane jako przedrostki używane w nomenklaturze ogólnej, ale nie jest dozwolone żadne podstawienie (patrz P-29.6.2.2).

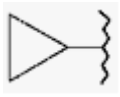
P-57.1.4 Zachowane przedrostki, obecnie niezalecane

Zachowane nazwy takie jak fenetyl (2-fenyloetyl) dla $C_6H_5\text{-}CH_2\text{-}CH_2-$; benzhydryl (difenylometyl) dla $(C_6H_5)_2CH-$; izobutyl (2-metylopropyl) dla $(CH_3)_2CH\text{-}CH_2-$; *sec*-butyl (butan-2-yl, 1-metylopropyl) dla $CH_3\text{-}CH_2\text{-}CH(CH_3)-$; izopentyl (3-metylobutyl) dla $(CH_3)_2CH\text{-}CH_2\text{-}CH_2$-; *tert*-pentyl (2-metylo-2-butanyl, 1,1-dimetylopropyl) dla $(CH_3)_2CH\text{-}CH_2\text{-}C(CH_3)_2-$ i neopentyl (2,2-dimetylopropyl) dla $(CH_3)_3C\text{-}CH_2-$nie są obecnie zalecane; preferowanymi nazwami przedrostków są nazwy podane w nawiasach.

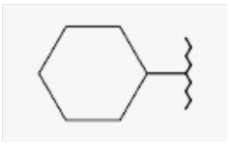
P-57.1.5 Przedrostki pochodzące od cyklicznych wodorków macierzystych

P-57.1.5.1 Preferowane przedrostki pochodzące od cykloalkanów sa ‘typu cykloalkilowego’ (patrz P-29.2); wszystkie preferowane przedrostki pochodzące od związków cyklicznych innych niż cykloalkany są typu ‘alkanylowego’ opisanego powyżej w P-56.1.1.1.

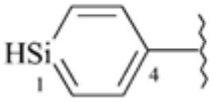
Przykłady:



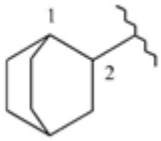
cyklopropyl (preferowany przedrostek)
cyklopropanyl



cykloheksyl (preferowany przedrostek)
cykloheksanyl



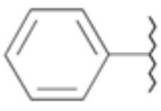
silin-4-yl (preferowany przedrostek)



bicyklo[2.2.2]oktanyl (preferowany przedrostek)
bicyklo[2.2.2]okt-2-yl

P-57.1.5.2 Zachowane przedrostki stosowane jako preferowane przedrostki (patrz P-29.6.1)

Następujące dwa przedrostki pozostawiono jako przedrostki preferowane z nieograniczonym podstawieniem:

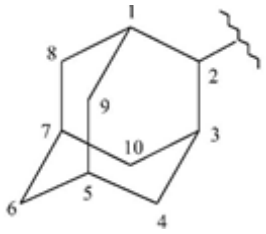


fenyl (preferowany przedrostek)

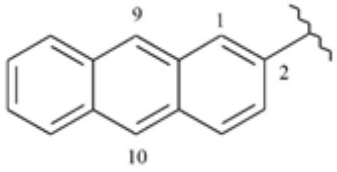
1,4-fenylen (także izomery 1,2- i 1,3)
(preferowany przedrostek)

P-57.1.5.3 Zachowane przedrostki zalecane do stosowania tylko w nomenklaturze ogólnej (P-29.6.2.3)

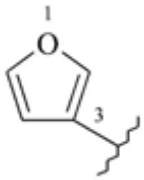
Następujące zachowane przedrostki są zalecane tylko w nomenklaturze ogólnej z nieograniczonym podstawieniem, za wyjątkiem tolilu, dla którego żadne podstawienie nie jest dozwolone:



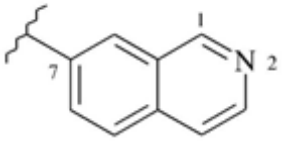
2-adamantyl (także 1-izomer)
adamantan-2-yl (preferowany przedrostek)



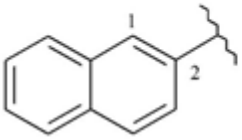
2-antryl (także 1- i 9-izomery)
antracen-2-yl (preferowany przedrostek)



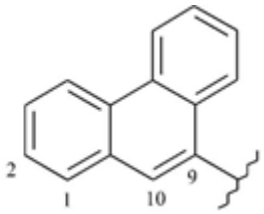
3-furyl (także 2-izomer)
furan-3-yl (także 2-izomer; (preferowane przedrostki)



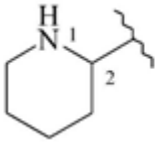
7-izochinolil (także 1-,3- 4-,5-,6- i 8- izomery)
izochinolin-7-yl (także 1-,3-, 4-,5-,6-, i 8- izomery; preferowane przedrostki)



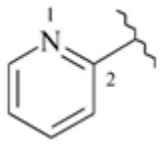
2-naftyl (także 1-izomer)
nafalen-2-yl (także 1-izomer; preferowane przedrostki)



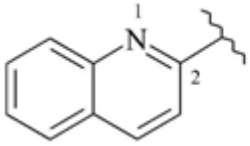
9-fenantryl (także 1-, 2-, 3 i 4-izomery)
fenantren-9-yl (także 1-, 2-, 3 i 4-izomery; preferowane przedrostki)



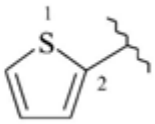
2-piperydyl (także 3-, 4- izomery)
piperydyn-2-yl (także 3-, 4- izomery; preferowane przedrostki)



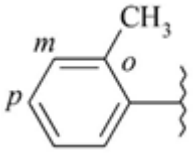
2-pirydyl (także 3-, 4- izomery)
pirydyn-2-yl (także 3-, 4- izomery; preferowane przedrostki)



2-chinolil (także 3-, 4-, 5-, 6-, 7-, i 8-izomery)
chinolin-2-yl (także 3-, 4-, 5-, 6-, 7-, i 8-izomery; preferowane przedrostki)



2-tienyl (także 3- izomer)
tiofen-2-yl (także 3- izomer; preferowane przedrostki)



o-tolil (także *m*- i *p*-izomery; podstawienie niedozwolone)
2-metylofenyl (także m- i p-izomery; preferowane przedrostki)

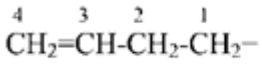
P-57.1.5.4 Zachowane przedrostki, które nie są obecnie rekomendowane

Obecnie nie zaleca się zachowanych przedrostków furfuryl (tylko 2- izomer) i tienyl (tylko 2-izomer) (patrz P-29.6.3).

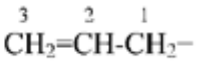
P-57.1.6. Przedrostki pochodzące od macierzystych wodorków ze zmodyfikowanymi stopniami hydrogenacji.

P-57.1.6.1 Wszystkie preferowane przedrostki pochodzące od macierzystych wodorków, których stopień hydrogenacji został zmodyfikowany, tworzy się systematycznie zgodnie z regułami dyskutowanymi w P-32. Należy dokonać wyboru, czy wolne wiązalności znajdują się w pozycji 1 czy w jakiejś innej pozycji łańcucha: preferowane przedrostki przypisuje się wówczas do łańcucha mniej rozgałęzionego (patrz przykład 3 poniżej, i liczne przykłady w P-32.1.1).

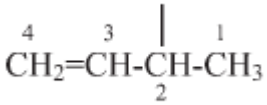
Przykłady



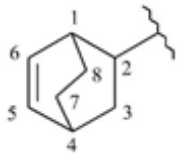
but-3-en-1-yl
(preferowany przedrostek)



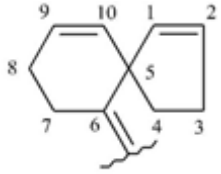
prop-2-en-1-yl
(preferowany przedrostek)



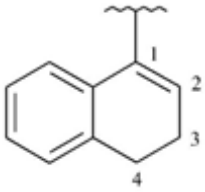
but-3-en-2-yl (preferowany przedrostek)
1-metyloprop-2-en-1-yl



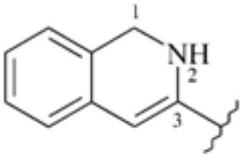
bicyklo[2.2.2]okt-5-en-2-yl
(preferowany przedrostek)



spiro[4,5]deka-1,9-dien-6-yliden
(preferowany przedrostek)



3,4-dihydronaftalen-1-yl
(preferowany przedrostek)



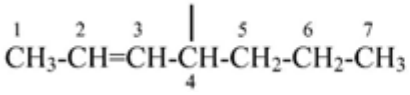
1,2-dihydroizochinolin-3-yl
(preferowany przedrostek)

P-57.1.6.2 Należy odnotować dwie ważne zmiany w stosunku do poprzednich zaleceń dotyczące przedrostków pochodzących od macierzystych wodorków ze zmodyfikowanym stopniem hydrogenacji.

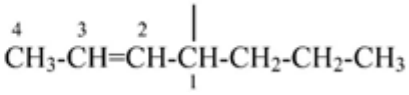
(1) W przedrostkach acyklicznych jako łańcuch główny wybierany jest najdłuższy łańcuch;

> W tych zaleceniach, jako główną zmianę w nazewnictwie podstawników wywodzących się od nienasyconych związków acyklicznych przyjęto, że najdłuższy łańcuch jest wybierany jako łańcuch macierzysty, niezależnie od liczby i typu wiązań wielokrotnych.

Przykłady:



hept-2-en-4-yl (typ alkanylowy;
patrz P-29.1 metoda (2)

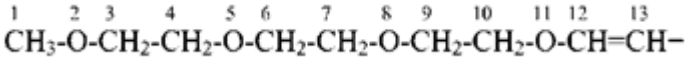


1-propylobut-2-en-1-yl (typ alkilowy;
patrz P-29.1 metoda (1)

(2) W acyklicznych przedrostkach pochodzących od alkanów zmodyfikowanych zastosowaniem nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu, przedrostki ‘a’ mają starszeństwo względem przyrostków takich jak ‘yl’ i ‘yliden’.

> Ustalona numeracja macierzystych struktur nazwanych według nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu jest podstawową zmianą w stosunku do reguły C-06 (lit. 1), gdzie dla niższych lokantów główna grupa charakterystyczna i wolna walencyjność były preferowane względem heteroatomów dla niższych lokantów

Przykład:



2,5,8,11-tetraoksatridec-12-en-13-yl (preferowany przedrostek)
(nie 3,6,9,12- tetraoksatridec-1-en-1-yl; przyrostek 'yl' jest dodany do nazwy macierzystego wodorku 2,5,8,11-tetraoksatridekanu)

P-57.16.3 Zachowane przedrostki pochodzące od macierzystych wodorków ze zmodyfikowanym stopniem hydrogenacji.

Nie ma zachowanych przedrostków pochodzących od macierzystych wodorków o zmodyfikowanym stopniu hydrogenacji, które byłyby rekomendowane jako preferowane. Zachowane przedrostki winyl (etenyl) dla $CH_2=CH-$; winyliden (etenyliden) dla $CH_2=C=$, allil (prop-2-en-1-yl) dla $\overset{3}{C}H_2=\overset{2}{C}H-\overset{1}{C}H_2$; alliliden (propen-2-en-1-yliden) dla $\overset{3}{C}H_2=\overset{2}{C}H-\overset{1}{C}H=$; i i allilidyn (prop-2-en-1-yn) dla $CH_2=CH-C\equiv$; są nazwami zachowanymi ale tylko w nomenklaturze ogólnej (patrz P-32.3). Podstawienie jest dozwolone, ale nie przez grupy alkilowe ani przez inne grupy rozszerzające łańcuch węglowy ani przez grupy charakterystyczne wyrażone przyrostkami. Preferowane przedrostki podane są w nawiasach.

Przedrostek izopropenyl (prop-1-en-2-yl) dla $CH_2=C(CH_3)-$ jest przedrostkiem zachowanym, ale nie jest przedrostkiem zalecanym. Jest on akceptowany w ogólnym zastosowaniu, ale żadne podstawienie nie jest dozwolone. Preferowany przedrostek to prop-1-en-2-yl.

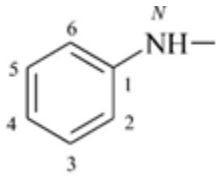
Przedrostki indan-2-yl, indolin-2-yl, izoindolin-2-yl, chroman-2-yl i izochroman-2-yl, jak również inne izomery, są zalecane tylko w nomenklaturze ogólnej, bez ograniczeń w podstawieniu (patrz Tabela 3.2).

P-57.2 PRZEDROSTKI WYWODZĄCE SIĘ Z GRUP CHARAKTERYSTYCZNYCH (FUNKCYJNYCH)

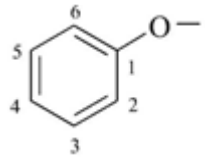
Nazwy przedrostków wywodzących się z grup charakterystycznych są albo nazwami zachowanymi albo są tworzone systematycznie z użyciem nomenklatury podstawnikowej. Zachowane przedrostki są opisane w P-35.2.1 i P-35.2.3. Systematyczne przedrostki podstawnikowe tworzy się w postępowaniu opisanym dla przedrostków pochodzących od macierzystych wodorków (patrz P-56.1.1). W istocie, przedrostki pochodzące od grup charakterystycznych są tymi pochodzącymi od macierzystych wodorków grup 17, 16 i od azanu w grupie 15. Są one omawiane w P-35.2.2.

P-57.3 PRZEDROSTKI WYWODZĄCE SIĘ Z ORGANICZNYCH ZWIĄZKÓW O MACIERZYSTYCH FUNKCJACH

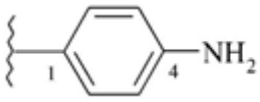
Nazwy przedrostków pochodzących od związków o macierzystych funkcjach są albo nazwami zachowanymi albo są tworzone systematycznie z użyciem nomenklatury podstawnikowej. Zachowane przedrostki odpowiadające związkom o macierzystych funkcjach używane jako preferowane przedrostki opisano w P-34.1.1.5. Zachowane przedrostki pochodzące od związków funkcyjnych, które mogą być użyte tylko w nomenklaturze ogólnej opisano rozdziale P-6 w sekcjach odnoszących się do odpowiednich klas związków. Załącznik 2 zawiera wszystkie przedrostki pochodzące od wodorków o macierzystych funkcjach.



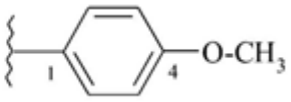
anilino (preferowany przedrostek)
(zachowany prosty przedrostek pochodzący od aniliny; dozwolone jest całkowite podstawienie; patrz P-34.2.1.3)
fenyloamino



fenoksy (preferowany przedrostek)
(zachowany prosty przedrostek pochodzący od fenolu; dozwolone jest całkowite podstawienie; patrz P-62.2.1.1.3)



4-aminofenyl (preferowany przedrostek)
(systematyczny przedrostek zespolony)



4-metoksyfenyl (preferowany przedrostek)
(systematyczny przedrostek zespolony)

H-CO−
formyl (preferowany przedrostek, patrz P-65.1.7.2.1)

CH_3-CO−
acetyl (preferowany przedrostek, patrz P-65.1.7.2.1)

P-57.4 TWORZENIE LINIOWYCH ZESPOLONYCH I /LUB KOMPLEKSOWYCH PRZEDROSTKÓW PODSTAWNIKOWYCH

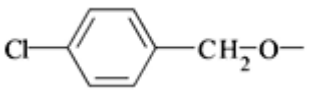
Liniowe przedrostki zespolone i kompleksowe tworzy się stopniowo postępując wstecz składnik po składniku od wolnej wiazalności. Na każdym etapie gdzie wybór jest możliwy wybierany jest składnik najbardziej znaczący w nomenklaturze.

Przedrostki skrócone, takie jak metoksy uwzględnia się w ich systematycznej nieskróconej formie, to jest metyloksy.

Przykłady:

C_6H_5-CH_2O− benzyloksy (przedrostek preferowany)
fenylometoksy

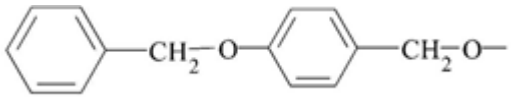
Wyjaśnienie: Głównym składnikiem w obu przedrostkach jest ‘oksy’ (metoksy jest traktowane jako metyl i oksy). Dla następnego składnika pozostaje wybór pomiędzy ‘metyl’ i ‘benzyl’. Wybrany jest ‘benzyl’ jako większy niż ‘metyl’ co prowadzi do przedrostka ‘benzyloksy’.



(4-chlorofenylo)metoksy (preferowany przedrostek)
[nie (4-chlorobenzyl)oksy]

Wyjaśnienie: Pierwszym składnikiem w obu przedrostkach jest ‘oksy’(metoksy jest traktowane jako metyl i oksy). Dla następnego składnika pozostaje wybór pomiędzy ‘metyl’ i podstawiony ‘benzyl’. Ponieważ benzyl nie jest podstawialny następnym w kolejności preferowanym składnikiem jest alternatywny ‘metyl’ co prowadzi do

‘(fenylometyl)oksy’ i w końcu do ‘(4-chlorofenylo)metoksy’.

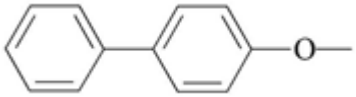


4-[4-(benzyloksy)fenylo]metoksy (preferowany przedrostek)

Wyjaśnienie: Pierwszym podstawnikiem jest ‘oksy’. Następna grupa ‘benzyl’ jest podstawiona stąd nazwa drugiego składnika jest ‚jak pokazano w drugim przykładzie powyżej, ‘fenylometoksy’. Trzecim składnikiem jest ‘benzyloksy’, jak opisano w pierwszym przykładzie powyżej, co prowadzi do nazwy 4-[4-(benzyloksy)fenylo]metoksy.

C_6H_5-NH-CO-CH_2− 2-anilino-2-oksoetyl (preferowany przedrostek)

Wyjaśnienie: Pierwszy składnik wymaga wyboru pomiędzy grupą ‘metyl’ i (podstawioną) grupą ‘etyl’. Wybrana jest większa grupa ‘etyl’. Następnie dla drugiego składnika dokonuje się wyboru pomiędzy ‘fenyloamino’ i ‘anilino’.‘Anilino’ jest wybrany jako zachowany przedrostek preferowany względem ‘fenyloamino’(patrz P-62.2.1.1.1.) co prowadzi do przedrostka ‘2-anilino-2-oksoetyl’.



[1,1′-bifenyl]-4-yloksy (preferowany przedrostek)
(nie 4-fenylofenoksy)

Wyjaśnienie: Głównym składnikiem jest ‘oksy’ (‘fenoksy’ jest traktowane jako ‘fenyl’ i ‘oksy’).

Następnym składnikiem jest ‘[1,1'-bifenyl]-4-yl’ pochodzący od preferowanej zachowanej nazwy ‘1,1′-bifenyl' (patrz P-29.3.5), który jest większy niż ‘fenyl’ co skutkuje przedrostkiem ‘[1,1′-bifenyl]-4-yloksy’.

$(CH_3)_2$N-CO-NH-N=

(dimetylokarbamoilo)hydrazynyliden (preferowany przedrostek)
[nie (dimetyloamino)karbonylohydrazynyliden

Wyjaśnienie: Głównym składnikiem jest ‘hydrazynyliden’, który jest preferowany względem ‘diazanyliden’(patrz P-68.3.1.2.1). Następny składnik wymaga wyboru pomiędzy ‘karbamoil’a ‘karbonyl’; ‘karbamoil’jest większy i preferowany zgodnie z P-65.2.1.5, tak więc preferowanym przedrostkiem jest ‘(dimetylokarbamoilo)hydrazynyliden’

C_6H_{11}-CO-S−

(cykloheksanokarbonylo)sulfanyl (preferowany przedrostek)
[nie (cykloheksylokarbonylo)sulfanyl]

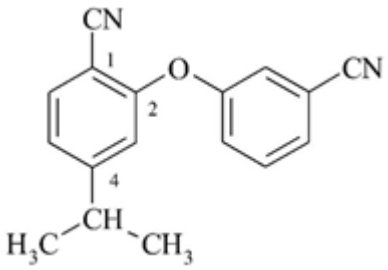
Wyjaśnienie: Głównym składnikiem w obu przedrostkach jest ‘sulfanyl’. Dla drugiego składnika następuje wybór pomiędzy ‘cykloheksanokarbonyl’ i ‘karbonyl’; ‘cykloheksanokarbonyl’ jest większy i jest preferowany względem dwuczłonowego przedrostka ‘cykloheksylokarbonyl’ (patrz P-65.4.1), tak więc preferowanym przedrostkiem jest ‘(cykloheksanokarbonylo)sulfanyl’.

P-58. WYBÓR PREFEROWANYCH NAZW IUPAC

P-58.1 WPROWADZENIE

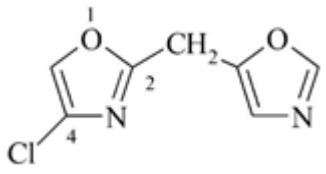
Podrozdział P-45 zawiera hierarchiczne reguły wyboru preferowanych nazw IUPAC dla ustalenia jednej macierzystej struktury, oparte na porządku starszeństwa (patrz P-44). Preferowane nazwy IUPAC tworzy się pod warunkiem, że nazwa struktury macierzystej i nazwy wszystkich lub części składników są preferowanymi nazwami IUPAC. Kiedy ten warunek nie jest spełniony i kiedy nazwy składników są akceptowalne dla nomenklatury ogólnej, utworzone nazwy związków są akceptowalne dla tejże ogólnej nomenklatury.

Przykłady:



2-(3-cyjanofenoksy)-4-propan-2-ylo)benzonitryl (PIN)
[nie 3-[2-cyjano-5-(propan-2-yl)fenoksy]benzonitryl; preferowana nazwa IUPAC ma więcej przedrostków (patrz P-45.1.1)]

Wyjaśnienie: Nazwa 2-(3-cyjanofenoksy)-4-izopropylobenzonitryl byłaby akceptowalna w nomenklaturze ogólnej zgodnie z P-29.6.2.2



4-chloro-2-[(1,3-oksazol-5-ylo)metylo]-1,3-oksazol (PIN)
[nie 2-[4(chloro-1,3-oksazol-5-ylo)metylo]-1,3-oksazol; preferowana nazwa IUPAC ma więcej przedrostków (patrz P-45.1.1)]
4-chloro-2-(izoksazol-5-ylometylo)-izoksazol

P-58.2 WSKAZANY ATOM WODORU, ‘DODANY WSKAZANY ATOM WODORU’ I NIEROZŁĄCZNE PRZEDROSTKI HYDRO

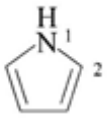
P-58.2.1 Wskazany atom wodoru (patrz także P-14.7.1).

Wskazany atom wodoru, jeśli potrzebny, zawsze umieszcza się na początku nazwy układu pierścieni spiro, mostkowych układów pierścieni lub zespołów pierścieni, co jest zmianą jego pozycji w porównaniu z wcześniejszymi zaleceniami dla mostkowych układów pierścieni lub zespołów pierścieni gdzie był umieszczany przy nazwie indywidualnego pierścienia.

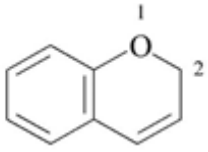
P-58.2.1.1 W wielu pierścieniach ‘mancude’ (patrz P-22.2.2.1.4), skondensowanych układach pierścieni (patrz P-25.7.1.3), układach mostkowych skondensowanych pierścieni (patrz P-25.7.1.3.2) układach pierścieni spiro (patrz P-24.3) lub zespołach pierścieni (patrz P-28.2.3) koniecznym jest określenie atomów wodoru przyłączonych do atomów pierścienia, połączonych tylko pojedynczym wiązaniem z sąsiadującymi atomami pierścienia, aby zasady nomenklatury podstawnikowej mogły być użyte do opisu grup charakterystycznych, wolnych wartościowości lub fragmentów jonowych. Dokonuje się tego określając obecność atomu wodoru w takich pozycjach pisaną kursywą dużą literę ‘*H*’ poprzedzoną odpowiednim lokantem liczbowym i umieszczoną na początku nazwy; ten wskaźnik nazywa się ‘wskazanym atomem wodoru’. Jest on często pomijany w najbardziej pospolitych izomerach lub kiedy nazwa jest jednoznaczna; jednakże w preferowanych nazwach IUPAC wskazany atom wodoru, kiedy występuje w danej strukturze, zawsze musi być podawany w nazwie.

P-58.2.1.2 W macierzystych wodorkach, wskazane atomy wodoru (patrz P-14.7) są wymieniane w najniższych pozycjach nieangularnych (patrz P-25.0) pierścienia lub układów pierścieni zgodnie z maksymalną liczbą niesprzężonych wiązań podwójnych, tak jak opisano w P-25.7. Wskazanym atomom wodoru przypisuje się niskie lokanty kiedy stopień nienasycenia jest modyfikowany przez użycie przedrostków ‘hydro’.

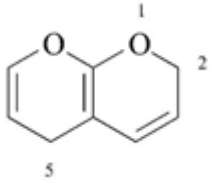
Przykłady:



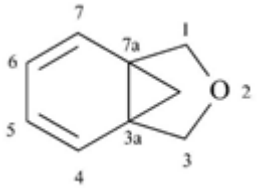
1*H*-pirol



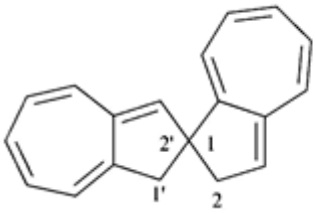
2*H*-1-benzopiran



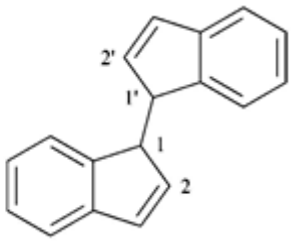
2*H*,5*H*-pirano[2,3-*b*]piran



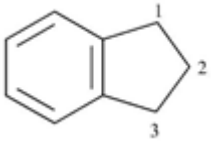
1*H*,3*H*-3a,7a-metano[2]benzofuran (PIN)



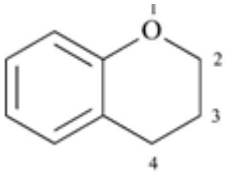
1′*H*,2*H*-1,2′-spirobiazulen (PIN)



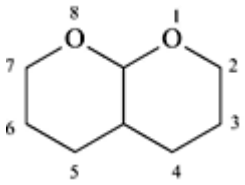
1*H*,1′*H*-1,1′-biinden (PIN)



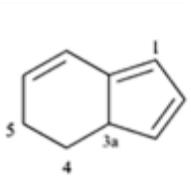
2,3-dihydro-1*H*-inden
(nie 1,3-dihydro-2*H*-inden;
ani 1,2-dihydro-3*H*-inden)



3,4-dihydro-2*H*-1-benzopiran (PIN)
(nie 2,3-dihydro-4*H*-1-benzopiran; aczkolwiek inne kombinacje wskazanego atomu wodoru są możliwe, ta kombinacja ma najniższe możliwe lokanty strukturalnie dozwolone dla tego związku)



heksahydro-2*H*,5*H*-pirano[2,3-*b*]piran (PIN)



3a,5-dihydro-4*H*-inden
(nie 4,5-dihydro-3a*H*-inden)

P-58.2.2 ‘Dodany wskazany atom wodoru’

Drugi rodzaj wskazanego atomu wodoru opisuje atomy wodoru przyłączone do atomów pierścienia, związanych z sąsiadującymi atomami pierścienia pojedynczymi wiązaniami tylko jako konsekwencja dodania przyrostka opisującego modyfikację struktury. Ten rodzaj wskazanego atomu wodoru nazywa się ‘dodanym wskazanym atomem wodoru’ ponieważ jest on dodany do nazwy w wyniku operacji na macierzystym wodorku, który może, bądź nie, zawierać wskazanego atomu wodoru. ‘Dodany wskazany atom wodoru’ jest wymieniany w nawiasach po lokancie cechy strukturalnej, do której się on odnosi. Metoda ta jest zalecana dla preferowanych nazw IUPAC zamiast użycia nierozłącznych przedrostków hydro (patrz P-58.2.5).

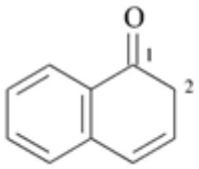
Uwaga: Wskazany atom wodoru użyto w sposób opisany w P-58.2.1, ale był zastosowany po wprowadzeniu głównej grupy charakterystycznej. To znacznie zmniejsza potrzebę stosowania ‘dodanego wskazanego atomu wodoru’. Metodę tą zastosowano w Instytucie Beilsteina i można ją znaleźć w *Beilsteins Handbuch der Organischen Chemie,* Springer Verlag, wydawnictwa 1909-1959. Nie jest ona zalecana w tworzeniu nazw IUPAC, ale można ją znaleźć w nazwach zamieszczanych w literaturze.

P-58.2.2.1 Ogólna metodologia

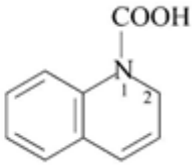
Obecność co najmniej jednego atomu wodoru na atomie pierścienia połączonym z sąsiadującymi atomami pierścienia tylko pojedynczymi wiązaniami, co wynika z wprowadzenia głównej grupy charakterystycznej, wolnej wartościowości, rodnika, lub centrum jonowego do wielopierścieniowego układu ‘mancude’, przy braku lub niedostatku wystarczającej liczby atomów wodoru wskazuje się za pomocą pisanej kursywą dużej litery ‘*H*’ następującej po lokancie pierścienia atomu dla każdej takiej pozycji. Określenie takiego ‘wskazanego atomu wodoru’ jest

zamknięte w nawiasach i wprowadzone do nazwy bezpośrednio po lokantach dla wolnej wartościowości, rodnika, centrum jonowego lub głównej grupy charakterystycznej.

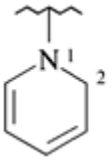
Przykłady:



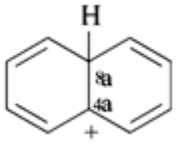
naftalen-1(2*H*)-on (PIN)



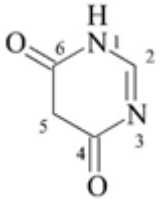
kwas chinolino-1(2*H*)-karboksylowy (PIN)



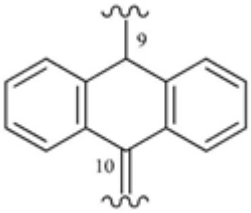
pirydyn-1(2*H*)-yl
(preferowany przedrostek)



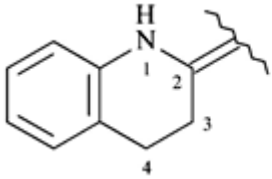
naftalen-4a(8a*H*)-ylium (PIN)



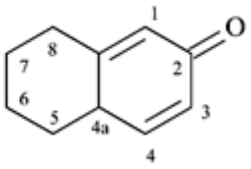
pirymidyno-4,6(1*H*,5*H*)-dion (PIN)



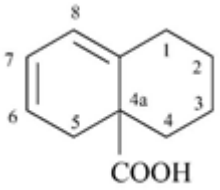
antracen-9-yl-10(9*H*)-yliden
(preferowany przedrostek)



3,4-dihydrochinolin-2(1*H*)-yliden



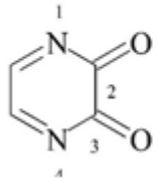
5,6,7,8-tetrahydronaftalen-2(4a*H*)-on



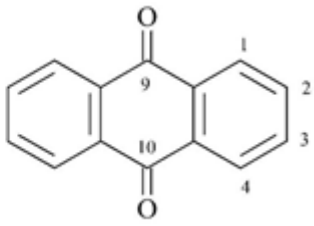
kwas 1,3,4,5-tetrahydronaftaleno-4a(2*H*)-karboksylowy
(izomer 4a(1*H*)- nie jest zgodny z rozmieszczeniem podwójnych wiązań w związku ‘mancude’)

P-58.2.2.3 Nie wymienia się ‘dodanych wskazanych atomów wodoru’ kiedy rozmieszczenie pary głównych grup charakterystycznych lub wolnych wartościowości w prosty sposób usuwa wiązanie podwójne (bezpośrednio lub po jego przegrupowaniu) z macierzystej struktury pierścienia.

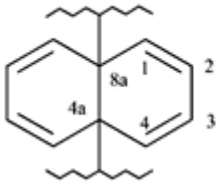
Przykłady:



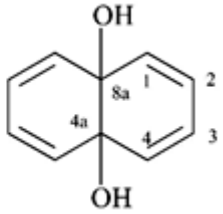
pirazyno-2,3-dion (PIN)



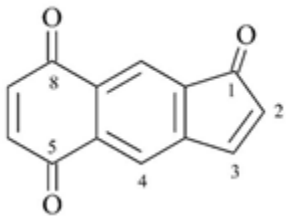
antraceno-9,10-dion (PIN)



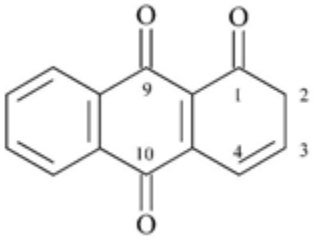
naftaleno-4a,8a-diyl
(preferowany przedrostek)



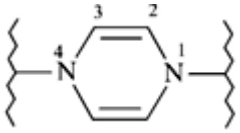
naftaleno-4a,8a-diol (PIN)



1*H*-cyclopenta[*b*]naftaleno-1,5,8-trion (PIN)



antraceno-1,9,10(2*H*)-trion (PIN)



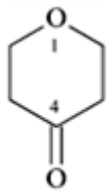
pirazyno-1,4-diyl (preferowany przedrostek)

P-58.2.3 Specyficzne reguły właściwe dla wskazanego atomu wodoru, ‘dodanego wskazanego atomu wodoru’ i przedrostków hydro.

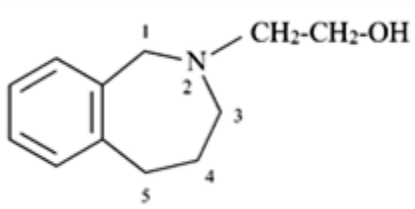
P-58.2.3.1 Wskazany atom wodoru jest umieszczany w dowolnej pozycji pierścienia tak aby dostosować główne grupy charakterystyczne lub wolne wartościowości wskazane przyrostkami, z założeniem, że liczba wskazanych atomów wodoru zdolnych do dostosowania wszystkich głównych grup charakterystycznych lub wolnych wartościowości jest im równa lub większa.

P-58.2.3.1.1 Kiedy liczba wskazanych atomów wodoru jest równa liczbie dostosowywanych głównych grup charakterystycznych lub wolnych wartościowości, to te wskazane atomy wodoru są umieszczane w angularnych lub nieangularnych pozycjach mogacych przyjąć te grupy charakterystyczne lub wolne wartościowości. Lokanty dla przedrostków ‘hydro’są lokantami pozycji nasyconych.

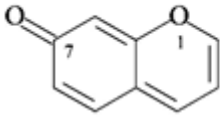
Przykłady:



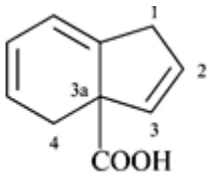
tetrahydro-4*H*-piran-4-on



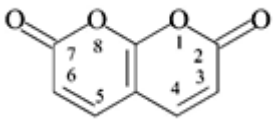
2-(1,3,4,5-tetrahydro-2*H*-2-benzoazepin-2-ylo)etanol (PIN)
1,3,4,5-tetrahydro-2*H*-2-benzoazepino-2-etanol



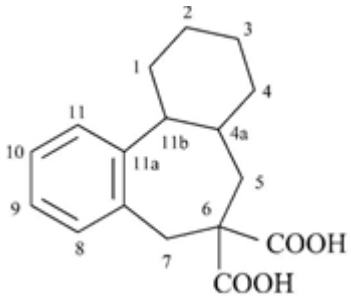
7*H*-1-benzopiran-7-on (PIN)



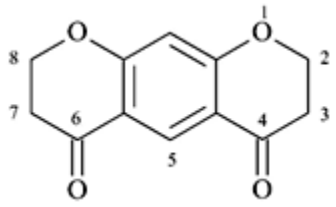
kwas 1,4-dihydro-3a*H*–indeno-3a-karboksylowy



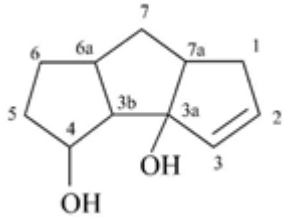
2*H*,7*H*-pirano[2,3-*b*]pirano-2,7-dion (PIN)



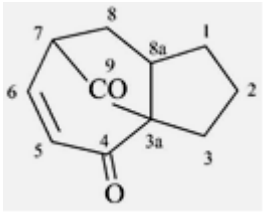
kwas 1,2,3,4,4a,5,7,11b-oktahydro-6*H*-dibenzo[*ac*]cyklohepteno-6,6-dikarboksylowy (PIN)



2,3,7,8-tetrahydro-4*H*,6*H*-benzo [1,2-*b*;5,4-*b'*]dipirano-4,6-dion



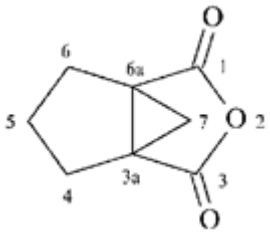
1,3b,4,5,6,6a,7,7a-oktahydro-3a*H*-cyklopenta[*a*]pentaleno-3a,4-diol (PIN)



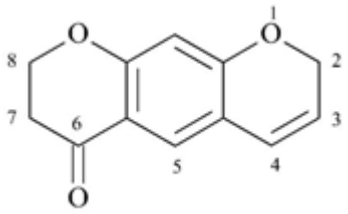
1,2,3,7,8,8a-heksahydro-4*H*-3a,7-metanoazuleno-4,9-dion (PIN)

P-58-2.3.1.2 Kiedy jest więcej wskazanych atomów wodoru, które mogą być użyte do umieszczenia wszystkich głównych grup charakterystycznych i wolnych wartościowości w strukturze związku, pozostające wskazane atomy wodoru przypisuje sie najniższym nieangularnym pozycjom zgodnym z pozycją podwójnych wiązań w związku. Lokanty dla przedrostków ‘hydro’są lokantami pozycji nasyconych.

Przykłady:



dihydro-1*H*,3*H*,4*H*-3a,6a-metanocyklopenta[*c*]furano-1,3-dion (PIN)
(nie 1*H*,3*H*,6*H*-3a,6a-metanocyklopenta[c]furano-1,3-dion; 4*H* jest niższy niż 6*H*)



7,8-dihydro-2*H*,6*H*-benzo[1,2-*b*:5,4-*b'*]dipiran-6-on (PIN)
(nie 2,3-dihydro-4*H*,8*H*-benzo[1,2-*b*:5,4-*b'*]dipiran-6-on;
'2*H*,6*H*' jest niższe niż '4*H*,8*H*')
(nie 2*H*,8*H*-benzo[1,2-*b*:5,4-*b'*]dipiran-4(3*H*)-on;
'2*H*,6*H*' jest niższe niż '2*H*,8*H*')

P-58.2.3.1.3 Kiedy liczba wskazanych atomów wodoru jest niższa od liczby grup charakterystycznych, stosuje się następujące zasady:

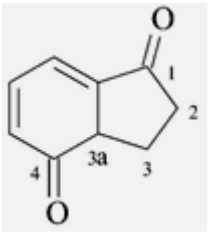
(1) co najmniej jeden ze wskazanych atomów wodoru zostaje przypisany do pozycji nieangularnej mającej najniższe lokanty, zgodne z układem 'mancude' podwójnych wiązań jak opisano w P-58.2.1.2.

(2) inne wskazane atomy wodoru zostają przypisane do pozycji innych niż przyłączone grupy charakterystyczne lub wolne wartościowości

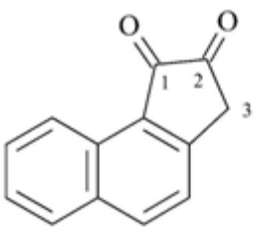
(3) główne grupy charakterystyczne lub wolne wartościowości które nie mogą być dostosowane sposobami opisanymi w pkt. (1) i (2) dostosowuje się używając 'dodany wskazany atomu wodoru' (patrz P-58.2.2)

(4) wskazane atomy wodoru, które nie mogą być użyte do dostosowania głównych grup charakterystycznych lub wolnych wartościowości mają pierwszeństwo do niższych lokantów względem 'dodanego wskazanego atomu wodoru'.

Przykłady:



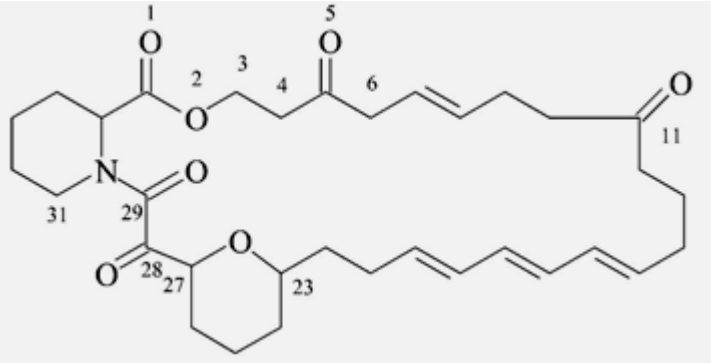
3,3a-dihydro-1*H*-indeno-1,4(2*H*)-dion (PIN)



1*H*-cyklopenta[*a*]naftaleno-1,2(3*H*)-dion (PIN)
(nie 3*H*-cyklopenta[a]naftaleno-1,2-dion)

Wyjaśnienie: W tym przypadku jest tylko jeden wskazany atom wodoru, ale występują

dwie główne grupy charakterystyczne, a zatem wskazany atom wodoru jest umieszczony w najniższej pozycji odpowiadającej rozmieszczeniu wiązań podwójnych w układzie pierścienia macierzystego.

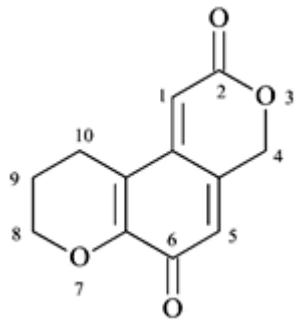


9,10,12,13,14,21,22,23,24,25,26,27,32,33,34,34a-heksadekahydro-3*H*-23,27-epoksypirydo[2,1-*c*][1,4]oksaazacyklohentriakontyno-1,5,11,28,29(4*H*,6*H*,31*H*)-penton (PIN)

Wyjaśnienie: Układ pierścienia wymaga tylko jednego wskazanego atomu wodoru, ale jest pięć miejsc ketonowych - głównych grup charakterystycznych; tak więc wskazany atom wodoru przypisano pozycji 3, najniższej z możliwych zgodnych z rozmieszczeniem wiązań podwójnych w strukturze związku (pozycja 1 nie jest możliwa ze względu na skondensowany pierścień piperydynowy). Miejsca ketonowe 28 i 29 po prostu usuwają podwójne wiązanie z układu skondensowanych pierścieni i nie wymagają dodawanych atomów wodoru. Miejsca ketonowe w pozycjach 1, 5 i 11 pozostają do przystosowania. Jak wskazano powyżej, ze względu na skondensowany pierścień piperydynowy musi być ‘dodany wskazany atom wodoru’i to w najniższej pozycji tego pierścienia, 31. Na koniec, dodane wskazane atomy wodoru wstawia się w najniższe pozycje zgodnie z rozmieszczeniem podwójnych wiązań w związku z przystosowaniem miejsc ketonowych 5 i 11 i dodana jest właściwa liczba przedrostków hydro.

P-58.2.3.1.4 Kiedy nie można użyć wskazanych atomów wodoru struktury macierzystej do przystosowania wszystkich głównych grup charakterystycznych stosuje się reguły opisane w P-58.2.3.1.3.

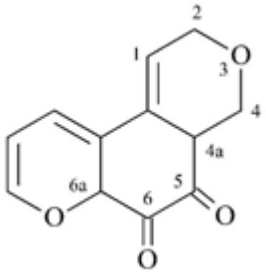
Przykłady:



9,10-dihydro-2*H*,4*H*-benzo[1,2-*b*:4,3-*c*′]dipirano-2,6(8*H*)-dion (PIN)

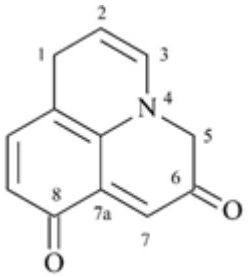
Wyjaśnienie: Wskazane atomy wodoru nie mogą dostosowywać pozycji obu głównych grup charakterystycznych ‘-on’, (2*H*,6*H*-benzo[1,2-*b*;4,3-*c*′]dipiran nie jest strukturą dopuszczalną) tak

więc wskazane atomy wodoru i ‘dodany wskazany atom wodoru’ umieszcza się w pozycjach o najniższych lokantach zgodnych z rozmieszczeniem w związku wiązań podwójnych.



4,4a-dihydro-2*H*,5*H*-benzo[1,2-*b*:4,3-*c'*]dipirano-5,6(6a*H*)-dion (PIN)
(nie 4,4a-dihydro-2*H*,4*H*-benzo[1,2-*b*:4,3-*c'*]dipirano-5,6(4a*H*,6a*H*)-dion)

Wyjaśnienie: Wskazane atomy wodoru nie mogą dostosowywać pozycji obu głównych grup charakterystycznych ‘-on’, dlatego jeden z nich jest przypisany pozycji o najniższym lokancie; drugi zaś pozycji ‘5’aby dostosować drugą z głównych grup charakterystycznych ‘-on’.



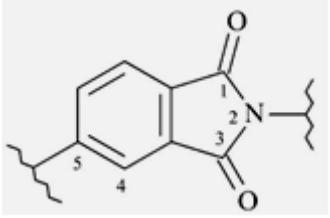
1*H*,5*H*-pirydo[3,2,1-*ij*]chinolino-6,8-dion (PIN)

Wyjaśnienie: Wskazane atomy wodoru też nie mogą dostosowywać żadnej z obu pozycji ‘on’ głównej grupy charakterystycznej; (6*H*,8*H*)-pirydo[3,2,1-*i*,*j*]chinolina nie jest dopuszczalną strukturą), tak więc wskazane atomy wodoru umieszcza się w pozycjach o najniższych lokantach zgodnych z rozmieszczeniem w związku wiązań podwójnych. Żaden ‘dodany wskazany atom wodoru’ nie jest konieczny ponieważ owe dwie główne grupy charakterystyczne ‘on’ po prostu usuwają ze struktury macierzystej jedno wiązanie podwójne.

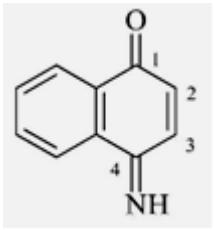
P-58.2.4 Nomenklatura przedrostków

Po wprowadzeniu wskazanego i ‘dodanego wskazanego atomu wodoru’, wszystkie podstawniki nie wyrażone przyrostkami wskazuje się przedrostkami.

Przykłady:



1,3-diokso-1,3-dihydro-2*H*-izoindolo-2,5-diyl (preferowany przedrostek)



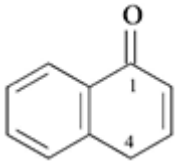
4-iminonaftalen-1(4*H*)-on (PIN)

P-58.2.5 Nierozłączne przedrostki hydro *vs*. wskazane atomy wodoru

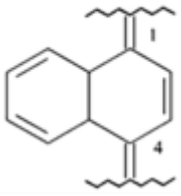
Alternatywną metodą dla ‘dodanego wskazanego atomu wodoru’ w dostosowaniu głównych grup charakterystycznych, wolnych wartościowości, rodników lub centrów jonowych w macierzystych wodorkach ‘mancude’ gdzie nie ma wystarczającej liczby atomów wodoru dla wykonania podstawowej operacji nomenklatury podstawnikowej, jest wyprowadzanie ich z odpowiedniej uwodornionej pochodnej macierzystego pierścienia.

Reguła C-16.11 w *IUPAC Nomenclature of Organic Chemistry,* wyd. 1979 r (lit. 1) dopuszcza aby przedrostki hydro były albo nierozłączne, czyli zawsze wymieniane na początku nazwy macierzystej w pełni nasyconej struktury i tworząc w ten sposób nowy macierzysty wodorek i odróżniając go od w pełni nasyconego analogu, lub rozłączne, to jest wskazywane przedrostkiem na początku nazwy, ale alfabetyzowane wśród innych przedrostków, w pełni nienasyconej struktury macierzystej. Przewodnik z 1993 r (lit. 2) sformalizował metodę nierozłączności. W tych zaleceniach użycie nierozłącznych przedrostków nie jest stosowane w preferowanych nazwach IUPAC, ale może mieć miejsce w nomenklaturze ogólnej. Metoda ta prowadzi często do różnic w numeracji struktury macierzystej (patrz czwarty przykład poniżej).

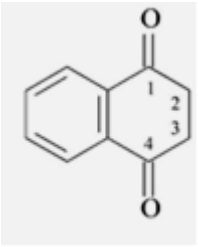
Przykłady:



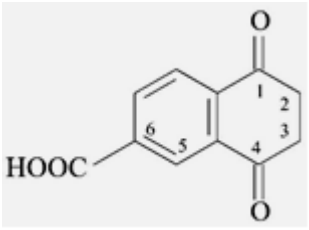
1,4-dihydronaftalen-1-on
naftalen-1(4*H*)-on (PIN)



1,4-dihydronaftaleno-1,4-diyliden
naftaleno-1,4-diyliden (preferowany przedrostek; patrz P-58.2.2.3)



1,2,3,4-tetrahydronaftaleno-1,4-dion
2,3-dihydronaftaleno-1,4-dion (PIN; patrz P-58.2.2.3)



kwas 1,4-diokso-1,2,3,4-tetrahydronaftaleno-6-karboksylowy (pokazana jest numeracja; nierozłączne przedrostki hydro są częścią macierzystego wodorku i mają pierwszeństwo do niższej numeracji przed główną grupą charakterystyczną).
kwas 5,8-diokso-5,6,7,8-tetrahydronaftaleno-2-karboksylowy (PIN) (rozłączne, ale niealfabetyzowalne przedrostki hydro, nie mają pierwszeństwa przed główną grupą charakterystyczną przy wyborze niższej numeracji, ale mają pierwszeństwo względem innych rozłącznych przedrostków)

P-58.3 HOMOGENICZNE ŁAŃCUCHY HETERO I GRUPY FUNKCYJNE

P-58.3.1 Wstępnie wybrane nazwy nierozgałęzionych homogenicznych heterocyklicznych macierzystych wodorków innych niż wodorki boru opisano w P-21.2.2. Potencjalna funkcyjność terminalnych grup takich jak − NH_2, − SH, lub −OH przyłączonych do macierzystych wodorków przez heteroatom jest ignorowana; one po prostu rozszerzają łańcuch. Łańcuchy borowe lub zawierające atomy chalkogenu, patrz P-68.

P-58.3.2 Kiedy jeden lub więcej atomów acyklicznego homogenicznego heterocyklicznego łańcucha może być wyrażony jako główna grupa charakterystyczna, związek o macierzystych funkcjach lub obowiązujący przedrostek, wówczas wyraża się ową główną grupę charakterystyczną lub obowiązujący przedrostek. Stąd też acykliczny homogeniczny heterocykliczny łańcuch można rozerwać aby uwzględnić starszą funkcję będącą główną grupą charakterystyczną, związkiem o macierzystych funkcjach lub obowiązujacym przedrostkiem.

Przykłady:

$HS\text{-}SO_2\text{-}S\text{-}S\text{-}S\text{-}SO_2\text{-}SH$ *S*-kwas trisulfanodisulfonotiowy (wstępnie wybrana nazwa) (nie heptasulfano-2,2,6,6-tetron)

$H_2N\text{-}NH\text{-}NH\text{-}NH\text{-}CO\text{-}C_6H_5$ *N*-triazan-1-ylobenzamid (PIN) [nie fenylo(tetraazan-1-ylo)metanon; ani 1-benzoilotetraazan]

$H_2N\text{-}NH\text{-}NH\text{-}NH\text{-}COOH$ kwas tetraazano-1-karboksylowy (PIN) (nie kwas triazan-1-ylokarbamowy; kwas karboksylowy jest starszy od pochodnej kwasu karbonowego

$CH_3\text{-}NH\text{-}N(COOH)\text{-}NH\text{-}CH_3$ kwas 1,3-dimetylotriazano-2-karboksylowy (PIN) (nie kwas bis(metyloamino)karbamowy; kwas karboksylowy jest starszy od pochodnej kwasu karbonowego

$(CH_3)_2P\text{-}P(OH)\text{-}P(CH_3)_2$ kwas bis(dimetylofosfanylo)fosfinawy (PIN) (nie 1,1,3,3-tetrametylotrifosfan-2-ol)

H_2N-NO	azanid nitrozylu (wstępnie wybrana nazwa) (nie hydrazynon; (patrz P-61-5.2)
H_2N-NH-NH-NCO	1- izocyjanianotriazan (PIN) (nie 1-(oksometylideno)tetraazan)
C_6H_5-CO-NH-NH-NH-NH-CO-C_6H_5	*N*,*N*′-(hydrazyno-1,2-diylo)benzamid (PIN)
OCN-NH-NO_2	*N*-izocyjanianonitroamid
HS-S-S-S-CO-C_6H_5	fenylo(tetrasulfanylo)metanon (PIN) (nie benzenokarbotian trisulfanylu; nie uwzględnia się pseudoestrów kiedy składnikiem alkoholowym jest atom chalkogenu (patrz P-65.6.3.4.2 i P-68.4.2.4)

P-59 TWORZENIE NAZWY

P-59.0 Wprowadzenie
P-59.1 Ogólna metodologia
P-59.2 Przykłady ilustrujące metodologię

P-59.0 WPROWADZENIE

W tym podrozdziale opisano procedurę systematycznego tworzenia preferowanych nazw IUPAC związków organicznych. Sposób ten można również zastosować przy tworzeniu nazw dla nomenklatury ogólnej.

P-59.1 OGÓLNA METODOLOGIA

Procedura tworzenia preferowanych systematycznych nazw związków organicznych obejmuje kilka kroków przedstawionych w tej i następnych subsekcjach. Postępuje się, w miarę jak są one stosowalne, w następującym porządku.

P-59.1.1 Na podstawie rodzaju związku określa się rodzaj (rodzaje) nomenklatury (patrz P-15) i operacje (patrz P-13), które mają być użyte. Aczkolwiek typ nomenklatury zwanej ‘nomenklaturą podstawnikową’ (patrz P-15.1) jest preferowany przy tworzeniu preferowanych nazw IUPAC i w nomenklaturze ogólnej, dla specyficznych grup związków należy użyć innych typów nomenklatury, kiedy jest to konieczne, w oparciu o następujące reguły:

(1) ‘nomenklatura klasowo-funkcyjna’, dla związków takich jak estry i halogenki kwasowe (patrz P-15.2 i P-51.2 dla preferowanych nazw IUPAC i w nomenklaturze ogólnej);
(2) ‘nomenklatura multiplikacyjna’ (patrz P-15.3 i P-51.3 dla preferowanych nazw IUPAC i w nomenklaturze ogólnej);
(3) ‘nomenklatura zamienna (‘a’) szkieletu’ (patrz P-15.4 i P-51.4 dla preferowanych

nazw IUPAC i w nomenklaturze ogólnej);

Kiedy w strukturze oznaczone są konfiguracje, należy wybrać uwzględniające konfigurację zgodnie z P-93.6 nomenklaturę podstawnikową lub multiplikacyjną

P-59.1.2 Określa się klasę do jakiej należy związek i grupę charakterystyczną wskazywaną przyrostkiem (jeżeli jest ona obecna) jak opisano w P-33, zgodnie z szeregiem starszeństwa klas opisanym w P-41 lub jako nazwę klasowo-funkcyjną (patrz P-15.2). Tylko jeden rodzaj grupy charakterystycznej (znanej jako grupa główna) może być wskazany przyrostkiem lub nazwą klasowo-funkcyjną.

Przyrostki wymienione w P-33 wykorzystuje się zarówno przy tworzeniu preferowanych nazw IUPAC jak i nazw w nomenklaturze ogólnej. Przy tworzeniu preferowanych nazw IUPAC i w nomenklaturze ogólnej obowiązuje porządek starszeństwa przyrostków opisany w P-43. Wszystkie atomy lub grupy nie wymienione w ten sposób należy wskazać przedrostkami podstawnikowymi.

Rodniki i jony nazywa się stosując przyrostki o specyficznych właściwościach, mogą być skumulowane pomiędzy sobą lub wspólnie z przyrostkami wyrażającymi grupy charakterystyczne (patrz rozdział P-7 o szeregu starszeństwa rodników i jonów używanych do tworzenia preferowanych nazw IUPAC i w nomenklaturze ogólnej).

P-59.1.3 Wybiera się macierzysty wodorek (wodorki), włączając odpowiednie nierozłączne przedrostki, jak opisano w rozdziale P-2 i w P-52 o wyborze preferowanych nazw IUPAC lub wybiera się funkcyjny związek macierzysty jak opisano w P-34 o preferowanych nazwach IUPAC albo w rozdziale P-6 opisującym różne klasy związków, takich jak aminy, alkohole itp. Dwa aspekty użycia funkcyjnych związków macierzystych to jest zastosowanie jako preferowanych nazw IUPAC lub w nomenklaturze ogólnej a także ich podstawialność. Określa się najstarszą strukturę macierzystą, albo w obecności przyrostka opisującego główną grupę charakterystyczną albo przy nieobecności takiego przyrostka. Na tym etapie należy wprowadzić wszystkie wymagane deskryptory wskazujące zmiany standardowej wiązalności i modyfikacje izotopowe.

P-59.1.4 Nazywa się macierzysty wodorek, jak opisano w P-59.1.3 i główną grupę charakterystyczną, jeżeli jest obecna, zgodnie z P-33, lub funkcyjny związek macierzysty zgodnie z P-34 i rozdziałem P-6 stosując reguły wskazane w P-43 aby uwzględnić modyfikacje funkcji. Dla ketonów i imin, przy tworzeniu nazw IUPAC i w nomenklaturze ogólnej stosuje się reguły omówione w P-58.2.

P-59.1.5 Wyznacza się wrostki i/lub przedrostki zgodnie z P-15.5, P-57, rozdziałem P-6 i załącznikiem 2 używając odpowiednich przedrostków multiplikacyjnych i numerując macierzystą strukturę, jak tylko to jest możliwe, z wykorzystaniem ogólnej zasady P-14.4.

P-59.1.6 Wskazuje się podstawniki i grupy charakterystyczne nie wymieniane jako grupy charakterystyczne i wymienia się je jako przedrostki (w kolejności alfabetycznej) zgodnie z P-34. P-34 podsumowuje użycie funkcyjnych związków macierzystych w nomenklaturze podstawnikowej, to jest wykorzystanie ich jako preferowanych nazw IUPAC i nazw w nomenklaturze ogólnej, w P-15 omówiono ich podstawialność. P-56 pozwala wybrać preferowaną nazwę IUPAC i dozwoloną

nazwę w nomenklaturze ogólnej i uzupełnia się je numerowanie struktury, jeżeli jest to konieczne, zgodnie z zasadami numeracji podanymi w P-14.4.

P-59.1.7 Łączy się ze sobą składniki nazwy zgodnie z regułami opisanymi w P-14 (zasady ogólne) dotyczącymi lokantów, numeracji, porządku alfanumerycznego, wskazanego i dodanego wskazanego atomu wodoru i sposobu zapisu nazwy uwzględniającego interpunkcję, kursywę, elizję, samogłoski i primy, opisane w P-16.

P-59.1.8 Uzupełnia się nazwę wszystkimi wymaganymi deskryptorami cech stereochemicznych zgodnie z regułami opisanymi w rozdziale P-9.

P-59.1.9 Grupy charakterystyczne

W nomenklaturze podstawnikowej niektóre grupy charakterystyczne mogą być zarówno przyrostkami lub przedrostkami (patrz P-33 i P-36), a inne, podane w Tabeli 5.1, tylko przedrostkami. Nazwy klasowo-funkcyjne różnią się tym że oddzielne słowo (lub w niektórych przypadkach przyrostek) określające nazwę klasowo-funkcyjną jest powiązane z nazwą podstawnika opisującego pozostałą część struktury.

Grupy charakterystyczne wskazywane przyrostkami w nomenklaturze podstawnikowej niekoniecznie muszą być identyczne z grupami określonymi w nazwach klasowo-funkcyjnych (np. butanon i keton etylowo-metylowy, gdzie ‘on’ oznacza =O, a ‘keton’ oznacza −CO−.

Grupy charakterystyczne przedstawione w Tabeli 5.1 zawsze wskazuje się przedrostkami w nazwie macierzystej struktury opisanej w rozdziale P-2. Jeżeli jest to konieczne dodaje się przedrostki zwielokrotniające i lokanty (patrz P-14.3).

Tabela 5.1. Grupy charakterystyczne zawsze wymieniane jako przedrostki w nomenklaturze podstawnikowej

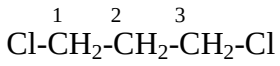
Grupa charakterystyczna	Przedrostek	Grupa charakterystyczna	Przedrostek
-Br	bromo	$-IO_2$[1]	jodyl
-BrO	bromozyl	$-IO_3$[1]	perjodyl
$-BrO_2$	bromyl	$-O-R$[2,3]	alkoksy
-Cl	chloro	$-O-O-R$[2,4]	alkiloperoksy
-ClO[1]	chlorozyl	$=N_2$	diazo
$-ClO_2$[1]	chloryl	$-N_3$	azydo
$-ClO_3$[1]	perchloryl	-NCO[5]	izocyjaniano
-F	fluoro	-NC	izocyjano
-FO[1]	fluorozyl	-NO[1]	nitrozo
$-FO_2$[1]	fluoryl	$-NO_2$[1]	nitro
$-FO_3$[1]	perfluoryl	$-S(O)-R$[2,6]	alkanosulfinylo
-I	jodo	$-S(O_2)-R$[2,6]	alkanosulfonylo
-IO[1]	jodozyl		

[1] Także analogi chalkogenowe takie jak tiochlorozylo, selenochlorylo, dtitiochlorylo i tionitrozo

[2] 'R' oznacza podstawnik 'organiczny' taki jak metoksy, pentyloksy, fenyloperoksy, metanosulfinylo lub metylosulfinylo i benzenosulfonylo lub fenylosulfonylo.

[3] Także analogi chalkogenowe, takie jak alkilo- lub arylosulfanyl, alkilo- lub aryloselanyl i alkilo- lub arylotellanyl.
[4] Także analogi chalkogenowe takie jak metoksysulfanyl, metylosufanyloksy i metylodisulfanyl.
[5] Także analogi chalkogenowe takie jak tiocyjaniano i selenocyjaniano.
[6] Także analogi selenowe i tellurowe, i wszystkie analogi chalkogenowe jak metanosulfinotioil i benzenoselenotelluronyl

Przykłady:



1,3-dichloropropan (PIN)

nitrozobenzen (PIN)

Grupy charakterystyczne inne niż te wymienione w Tabeli 5.1 mogą być wymieniane w nazwie macierzystego wodorku jako przyrostki lub przedrostki.

Jeżeli występują grupy charakterystyczne inne niż wymienione w Tabeli 5.1, to dla klas innych niż rodniki i jony tylko jedną z nich należy wskazywać przyrostkiem (główna grupa charakterystyczna).

Kiedy związek zawiera więcej niż jeden rodzaj grup charakterystycznych nie wymienionych w Tabeli 5.1, główną grupa charakterystyczną jest ta, która odpowiada klasie znajdującej się najwyżej w szeregu starszeństwa (jeżeli to konieczne, patrz P-41.2, P-42 i P-43). Wszystkie inne grupy charakterystyczne wskazuje się przedrostkami.

Kiedy podstawnik sam zawiera podstawniki (podstawnik zespolony, patrz P-35, P-36 i P-46) to wszystkie one traktuje się jako przedrostki. Podstawnik zawierający owe drugorzędne podstawniki sam taktowany jest jako podstawnik macierzysty (analogicznie do macierzystego wodorku). Nomenklatura całego podstawnika podlega wszystkim procedurom przyjetym dla danego związku, z dwoma wyjątkami, a mianowicie:

(a) nie ma żadnej grupy charakterystycznej wyrażonej przyrostkiem (zamiast tego używa się przyrostków takich jak ‘yl’, ‘yliden’ itp.)

(b) podstawnik znajduje się w pozycji o najmniejszym dozwolonym lokancie.

P-59.1.10 Cechy numeracji nomenklaturowej

Kiedy macierzysty wodorek (główny łańcuch, pierścień, lub układ pierścieni), grupa główna i podstawniki zostaną wybrane i nazwane, numerowanie całego związku następuje w oparciu o regułę najniższych lokantów. Ogólne reguły dotyczące lokantów i numeracji opisano w P-14.4. Znajdują one zastosowanie zawsze zarówno kiedy tworzona jest nazwa podstawnikowa lub klasowo-funkcyjna jak i dla wszystkich innych rodzajów nomenklatury.

> Lista starszeństwa elementów struktury uzyskujących najniższe możliwe lokanty została zmodydyfikowana przez przesunięcie umieszczenia przedrostka ‘a’ w łańcuchach nazywanych zgodnie z nomenklaturą zamienną (‘a’) szkieletu i przez nadanie specjalnego statusu rozłącznym przedrostkom hydro/dehydro.

Na ile poprzednie reguły pozostawiają wybór, punkt wyjściowy i kierunek numerowania przed podjęciem decyzji wybiera się tak, aby przypisać najniższe lokanty elementom struktury (jeżeli są one obecne) rozważanym w podanej kolejności przed podjęciem decyzji:

(a) ustalona numeracja, jak dla naftalenu, bicyklo[2.2.2]oktanu itp.;

(b) heteroatomy w związkach heterocyklicznych i w acyklicznych strukturach macierzystych;

(c) wskazany atom wodoru [w związkach niepostawionych; wyższy lokant może być potrzebny w innej pozycji dla uwzględnienia przyrostka podstawnikowego zgodnie z elementem struktury];
(d) grupa główna wskazana przyrostkiem;
(e) 'dodany wskazany atom wodoru' (odpowiadający strukturze związku i zgodny z dalszym podstawieniem);
(f) nasycenie (przedrostki 'hydro'/'dehydro') lub nienasycenie (końcówki 'en'/'yn')
(g) podstawniki wskazane przedrostkami (niskie lokanty przypisuje się podstawnikom niezależnie od rodzaju; następnie, jeżeli konieczne, w kolejności wymieniania w nazwie)

P-59.2 PRZYKŁADY ILUSTRUJĄCE OGÓLNĄ METODOLOGIĘ

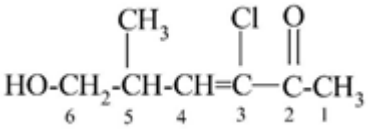
P.59.2.1 Wybór macierzystych wodorków
P-59.2.2 Starszeństwo heteroatomów względem głównych grup charakterystycznych
P-59.2.3 Starszeństwo głównych grup charakterystycznych względem nienasycenia
P-59.2.4 Starszeństwo przedrostków 'hydro'/'dehydro'względem wymiennych przedrostków
P-59.2.5 Dostosowanie wymiennych przedrostków

P.59.2.1 Wybór macierzystych wodorków

Po wybraniu i nazwaniu głównej grupy charakterystycznej, jedną z podanych poniżej metod wybiera się macierzysty wodorek lub funkcyjny związek macierzysty. O szczegółach numeracji patrz rozdział 2 opisujący numerację różnych wodorków macierzystych, a ogólną regułę najniższych lokantów sformułowano w P-14.3. O kolejności przedrostków patrz ogólna reguła dotycząca porządku alfanumerycznego opisana w P-14.5.

P.59.2.1.1 Jeżeli związek jest wyłącznie acykliczny to główny łańcuch wybiera się jako macierzysty wodorek metodą opisaną w P-44.

Przykład:



Analiza:

grupa główna:	>CO	on
macierzysty wodorek:	CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-CH_3	heksan
sfunkcjonalizowany macierzysty wodorek	CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-CO-CH_3	heksan-2-on
modyfikacja subtraktywna	CH_3-CH_2-CH=CH-CO-CH_3	heks-3-en-2-on
podstawniki:	−Cl	chloro
	−OH	hydroksy
	−CH_3	metyl

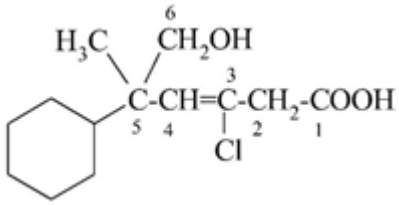
Wraz z innymi regułami powyższa analiza prowadzi do preferowanej nazwy IUPAC:

3-chloro-6-hydroksy-5-metylo-heks-3-en-2-on (PIN)

Wyjaśnienie: Przyrostek ‘on’ otrzymuje najniższy możliwy lokant ‘2’ co decyduje o kierunku numeracji łańcucha. Możliwe są dwa łańcuchy heksanowe; łańcuchem głównym zgodnie z kryteriami wyboru łańcucha głównego jest ten bardziej podstawiony (trzy podstawniki w porównaniu z dwoma). Nienasycenie jest odnotowywane końcówką ‘en’. Dodanie trzech przedrostków podstawnikowych, ułożonych w porządku alfanumerycznym, kończy nazwę.

P.59.2.1.2 Jeżeli grupa główna znajduje się tylko w łańcuchu zawierającym podstawnik cykliczny, związek nazywa się tak jak związek acykliczny, a składnik cykliczny wskazuje się przedrostkiem podstawnikowym.

Przykład:



Analiza:

grupa główna:	−(C)OOH	kwas -owy
macierzysty wodorek:	CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-CH_3	heksan
sfunkcjonalizowany macierzysty wodorek	CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-COOH	kwas heksanowy
modyfikacja subtraktywna	CH_3-CH_2-CH=CH-CH_2-COOH	kwas heks-3-enowy
podstawniki:	−Cl	chloro
	$-C_6H_{11}$	cykloheksyl
	−OH	hydroksyl
	$-CH_3$	metyl

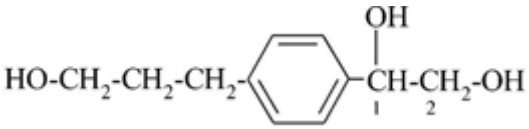
Wraz z innymi regułami powyższa analiza prowadzi do preferowanej nazwy IUPAC:

kwas 3-chloro-5-cykloheksylo-6-hydroksy-5-metyloheks-3-enowy (PIN)

Wyjaśnienie: O kierunku numeracji decyduje obecność grupy karboksylowej na końcu łańcucha. Zakończenie ‘enowy’ i przedrostki podstawnikowe są umieszczane w łańcuchu, w porządku alfanumerycznym, zgodnie z ustalona numeracją.

P-59.2.1.3 Jeżeli grupa główna pojawia się w dwóch lub więcej łańcuchach węglowych wzajemnie nie powiązanych (to znaczy nie tworzą ze sobą ciągłego lub rozgałęzionego łańcucha ale są rozdzielone np. pierścieniem lub heteroatomem) i kiedy nie jest możliwe zastosowanie nomenklatury multiplikacyjnej, jako macierzysty wodorek wybiera się łańcuch z największą liczbą grup głównych. Jeżeli liczba tych grup w dwóch lub więcej łańcuchach jest taka sama wyboru dokonuje się w oparciu o zasady wyboru łańcucha głównego.

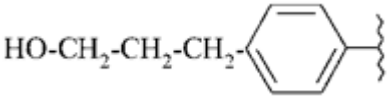
Przykład 1:



Analiza:

grupa główna:	−OH	diol
macierzysty wodorek:	CH_3-CH_3	etan
sfunkcjonalizowany macierzysty wodorek:	HO-CH_2-CH_2-OH	etanodiol

podstawnik:



składniki podstawnika:	−OH	hydroksy
	−CH_2-CH_2-CH_3	propyl
	−C_6H_5	fenyl

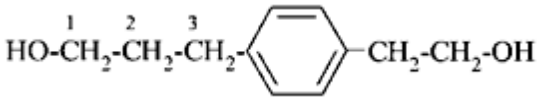
przedrostek podstawnikowy: 4-(3-hydroksypropylo)fenyl

Wraz z innymi regułami powyższa analiza prowadzi do preferowanej nazwy IUPAC:

1-[4-(3-hydroksypropylo)fenylo]etano-1,2-diol (PIN)

Przykład 2:

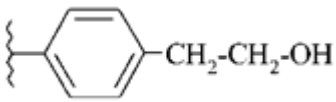
W tym przykładzie, zgodnie z kryteriami wyboru głównego łańcucha, jako macierzysty wodorek został wybrany najdłuższy łańcuch.



Analiza:

grupa główna:	−OH	ol
macierzysty wodorek:	CH_3-CH_2-CH_3	propan
sfunkcjonalizowany macierzysty wodorek:	CH_3-CH_2-CH_2-OH	propanol

podstawnik:



składniki podstawnika:	−OH	hydroksyl
	−CH_2- CH_3	etyl

	$-C_6H_5$	fenyl

przedrostek podstawnikowy: 4-(2-hydroksyetylo)fenyl

Wraz z innymi regułami powyższa analiza prowadzi do preferowanej nazwy IUPAC:

3-[4-(2-hydroksyetylo)fenylo]propan-1-ol (PIN)

Przykład 3:

Analiza:

grupa główna:	$-OH$	ol
macierzysty wodorek:	$CH_3\text{-}CH_2\text{-}CH_3$	propan
sfunkcjonalizowany macierzysty wodorek:	$^{3}CH_3\text{-}^{2}CH_2\text{-}^{1}CH_2\text{-}OH$	propan-1-ol
Multiplikacyjna grupa łącząca:	$-C_6H_4-$	1,4-fenylen

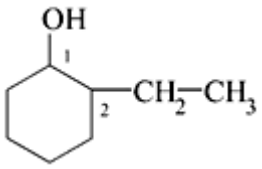
Wraz z innymi regułami powyższa analiza prowadzi do preferowanej nazwy IUPAC:

3,3′-(1,4-fenyleno)di(propan-1-ol) (PIN)

Wyjaśnienie: Nazwa multiplikacyjna jest tworzona wówczas gdy identyczne struktury macierzyste są symetrycznie przyłączone do składnika centralnego (dla preferowanej nazwy IUPAC macierzyste struktury muszą być podstawione symetrycznie). Numeracja zwielokrotnionej struktury macierzystej obejmująca grupę charakterystyczną, jeżeli istnieje, musi być zachowana.

P-59.2.1.4 Jeżeli grupa główna występuje tylko w pojedynczym układzie cyklicznym, dla nadania nazwy ten układ cykliczny jest wybrany macierzystym wodorkiem.

Przykład:



Analiza:

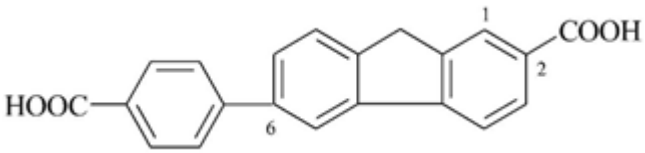
grupa główna:	$-OH$	ol
macierzysty wodorek:	C_6H_{12}	cykloheksan
sfunkcjonalizowany macierzysty wodorek:	$C_6H_{11}\text{-}OH$	cykloheksanol
podstawnik:	$-CH_2\text{-}CH_3$	etyl

Wraz z innymi regułami powyższa analiza prowadzi do preferowanej nazwy IUPAC:

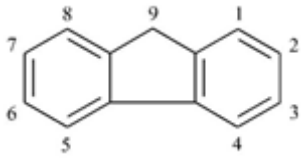
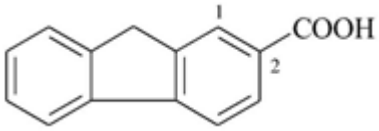
2-etylocykloheksan-1-ol (PIN)

P-59.2.1.5 Jeżeli grupa główna występuje w więcej niż jednym układzie cyklicznym, wybór układu cyklicznego jako macierzystego wodorku dla nomenklatury jest zgodny z kryteriami wyboru starszego pierścienia lub układu pierścieni.

Przykład:



Analiza:

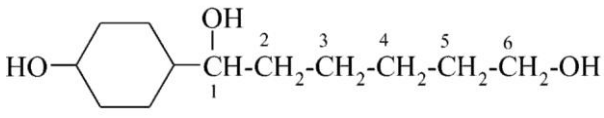
grupa główna:	−COOH	kwas karboksylowy
macierzysty wodorek		9*H*-fluoren
sfunkcjonalizowany macierzysty wodorek:		kwas 9*H*-fluoreno-2- karboksylowy:
podstawniki:		
składniki podstawnika:	$-C_6H_5$	fenyl
	−COOH	karboksyl

Wraz z innymi regułami powyższa analiza prowadzi do preferowanej nazwy IUPAC:

kwas 6-(4-karboksyfenylo)-9*H*-fluoreno-2-karboksylowy (PIN)

P-59.2.1.6 Jeżeli grupa główna występuje zarówno w łańcuchu jak i w pierścieniu, przy tworzeniu nazwy macierzysty wodorek jest tą częścią, w której występuje większa liczba grup głównych; jeżeli w dwóch lub więcej częściach liczba ta jest taka sama to jako macierzysty wodorek wybiera się pierścień lub układ pierścieni.

Przykład 1:



Analiza:

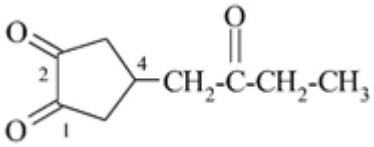
grupa główna:	−OH	diol

macierzysty wodorek:	CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-CH_3	heksan
sfunkcjonalizowany macierzysty wodorek:	HO^{1}-CH_2^{2}-CH_2^{3}-CH_2^{4}-CH_2^{5}-CH_2^{6}-CH_2-OH	heksanodiol
składniki podstawnika:	$-C_6H_{11}$	cykloheksyl
	−OH	hydroksyl

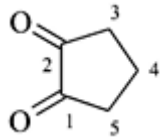
Wraz z innymi regułami powyższa analiza prowadzi do preferowanej nazwy IUPAC:

1-(4-hydroksycykloheksylo)heksano-1,6-diol (PIN)

Przykład 2:



Analiza:

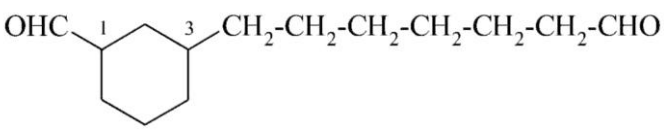
grupa główna:	(C)=O	dion
macierzysty wodorek:		cyklopentan
sfunkcjonalizowany macierzysty wodorek:		cyklopentano-1,2-dion
podstawniki:	=O	okso
	CH_3-CH_2-CH_2-CH_2−	butyl
przedrostek podstawnikowy:	2-oksobutyl	

Wraz z innymi regułami powyższa analiza prowadzi do preferowanej nazwy IUPAC:

4-(2-oksobutylo)cyklopentano-1,2-dion (PIN)

P-59.2.1.7 Jeżeli krotność występowania grup głównych w dwóch lub więcej znaczących nomenklaturowo częściach związku jest taka sama, preferowane nazwy IUPAC tworzy się wybierając pierścień lub układ pierścieni jako macierzysty wodorek do celów nomenklatury.

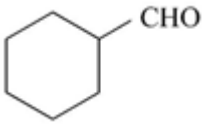
Przykład:



Analiza:

grupa główna:	−CHO	karboaldehyd

macierzysty wodorek: cykloheksan

sfunkcjonalizowany macierzysty wodorek: 

cykloheksanokarbaldehyd

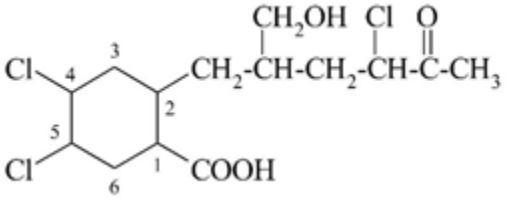
podstawnik: − CH_2-$[CH_2]_5$-CHO 7-oksoheptylo

Wraz z innymi regułami powyższa analiza prowadzi do preferowanej nazwy IUPAC:

3-(7-oksoheptylo)cykloheksano-1-karboaldehyd (PIN)

P-59.2.1.8 Kiedy podstawnik sam jest podstawiony, to wszystkie drugorzędne podstawniki określa się przedrostkami. Podstawniki zawierające podstawniki drugorzędne traktuje się jako ‘podstawniki macierzyste’, analogicznie do związków macierzystych. Tworzenie nazwy całego podstawnika podlega tym samym procedurom jak tworzenie nazw związków (np. wybór głównego łańcucha), z dwoma wyjątkami, a mianowicie: (a) nie używa się żadnych przyrostków, (b) miejsce przyłączenia podstawnika oznacza się najniższym dozwolonym numerem lokantu w zależności od nomenklatury podstawnika, grupy alkilowej lub alkanylowej.

Przykład:



Analiza:

główna grupa charakterystyczna: −COOH kwas karboksylowy

macierzysty wodorek: cykloheksan

podstawniki pierwszorzędowe: − Cl chloro

−CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-CH_3 heksylo

podstawniki drugorzędowe: − Cl chloro

=O okso

−CH_2-OH hydroksymetylo

podstawiony podstawnik: 4-chloro-2-(hydroksymetylo)-5-oksocykloheksylo

Wraz z innymi regułami powyższa analiza prowadzi do preferowanej nazwy IUPAC:

kwas 4,5-dichloro-2-[4-chloro-2-(hydroksymetylo)-5-oksoheksylo]cykloheksano-1-karboksylowy (PIN)

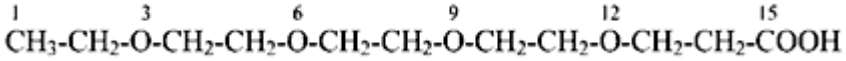
P.59.2.2 Starszeństwo heteroatomów względem przyrostków

Związki heterocykliczne i łańcuchy zmodyfikowane za pomocą nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu traktuje się podobnie, jako związki macierzyste z ustaloną numeracją. W konsekwencji, heteroatomy mają starszeństwo przy wyborze niższych lokantów, a przyrostkom przypisuje się następne, możliwie najniższe lokanty.

Ustalona numeracja heteroacyklicznych struktur macierzystych nazwanych przy użyciu nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu jest główną zmianą w regule C-0.6 (lit. 1) według której główne grupy charakterystyczne i wolne wartościowości były preferowane względem heteroatomów przy wyborze niskich lokantów.

P-59.2.2.1 Dla łańcuchów operację wymiany stosuje się do węglowodorowego macierzystego wodorku aby utworzyć nowy macierzysty wodorek z ustaloną numeracją. Przyrostki otrzymują najniższe z możliwych lokantów zgodnie z powstałą numeracją .

Przykład:



Analiza:

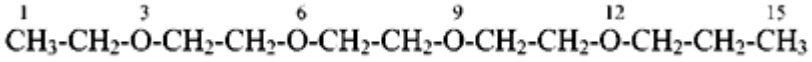
główna grupa charakterystyczna: −(C)OOH kwas –owy

węglowęglowodorowy

macierzysty wodorek: CH_3-$[CH_2]_{13}$-CH_3 pentadekan

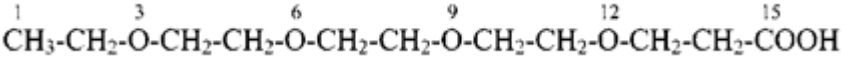
przedrostek nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu: −O− oksa

heteroacykliczny macierzysty wodorek:



3,6,9,12-tetraoksapentadekan

sfunkcjonalizowany heteroacykliczny macierzysty wodorek:



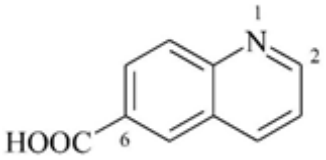
kwas 3,6,9,12-tetraoksapentadekan-15-owy

Wraz z innymi regułami powyższa analiza prowadzi do preferowanej nazwy IUPAC:

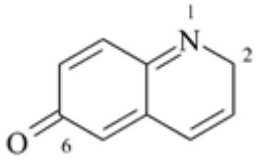
kwas 3,6,9,12-tetraoksapentadekan-15-owy (PIN)

P-59.2.2.2 Związki heterocykliczne o nazwach zachowanych lub systematycznych traktuje się jako macierzyste wodorki. W konsekwencji przyrostki są dodawane i przypisuje się im najniższe możliwe lokanty zgodnie z ustaloną numeracją pierścienia heterocyklicznego lub układu pierścieni. Dodanym wskazanym atomom wodoru, o ile zaistnieje taka potrzeba, przypisuje się kolejnym możliwie najniższym lokantom.

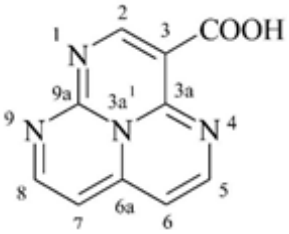
Przykłady:



kwas chinolino-6-karboksylowy (PIN)



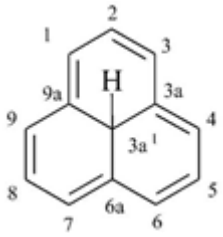
chinolin-6(2*H*)-on (PIN)



Analiza:

główna grupa charakterystyczna: −COOH kwas karboksylowy

węglowodorowy macierzysty wodorek:

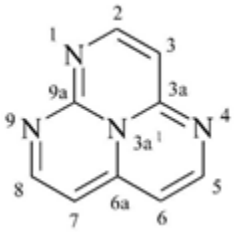


3a[1]*H*-fenalen

[Zwróćmy uwagę na nowy system numerowania wewnętrznych atomów w układach skondensowanych pierścieni, 3a[1] zamiast 9b; patrz P-25.3.3.3]

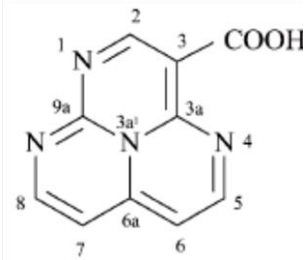
przedrostek nomenklatury (‘a’) zamiennej: −N< aza

heterocykliczny wodorek macierzysty:



1,3a′,4,9-tetraazafenalen

sfunkcjonalizowany heterocykliczny wodorek macierzysty:



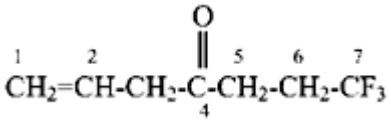
kwas 1,3a′,4,9-tetraaza-fenaleno-3-karboksylowy

Wraz z innymi regułami powyższa analiza prowadzi do preferowanej nazwy IUPAC:
kwas 1,3a′,4,9-tetraazafenaleno-3-karboksylowy (PIN)

P-59.2.3. Starszeństwo przyrostków względem nienasycenia

P-59.2.3.1 Po przyrostkach, jeżeli możliwy jest wybór, niskie lokanty przypisuje się końcówkom ‘en’ i ‘yn’, a następnie, w stosownych przypadkach, rozłącznym przedrostkom.

Przykład:



Analiza:

główna grupa charakterystyczna:	=O	-on
macierzysty wodorek:	CH_3-$[CH_2]_5$-CH_3	heptan
sfunkcjonalizowany macierzysty wodorek:	CH_3-$[CH_2]_2$ -CO- $[CH_2]_2$-CH_3	heptan-4-on
modyfikacja subtraktywna:	>C=C<	en
przedrostek podstawnikowy:	-F	fluoro

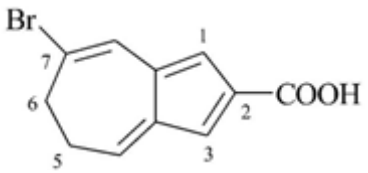
Wraz z innymi regułami powyższa analiza prowadzi do preferowanej nazwy IUPAC:

7,7,7-trifluorohept-1-en-4-on (PIN)

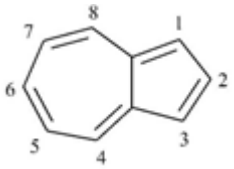
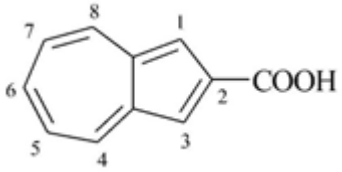
P-59.2.3.2 Przedrostki hydro i dehydro stosuje się do wyrażenia stopnia hydrogenacji macierzystego wodorku. W tych zaleceniach przedrostki te traktuje się jako rozłączne, ale tylko w kontekście numeracji; nie zalicza się ich do rozłącznych przedrostków podstawnikowych. W nazwach wprowadza się je bezpośrednio przed nazwą związku, po rozłącznych przedrostkach podstawnikowych uszeregowanych w porządku alfanumerycznym.

W tych zaleceniach przedrostki ‘hydro’ i ‘dehydro’ są rozłączne, ale nie są włączone do kategorii alfabetyzowanych przedrostków rozłącznych (patrz P-14.4; patrz także P-15.1.3.2, P-31.2, P-58.2) co jest zmianą w stosunku do wcześniejszych zaleceń (lit. 1,2). Kiedy wraz z końcówkami ‘en’ i ‘yn’ są stosowane do modyfikacji macierzystego wodorku ich użycie jest regulowane w oparciu o zasadę najniższych lokantów, zgodnie z numeracją macierzystego wodorku i po pierwszeństwie wskazanego atomu wodoru, ‘dodanego wskazanego atomu wodoru’ i przyrostkach, kiedy są one obecne, jak określają ogólne zasady numeracji (P-14.4).

Przykład:



Analiza:

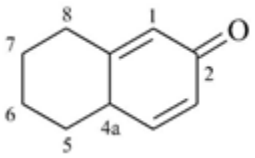
główna grupa charakterystyczna:	−COOH	kwas karboksylowy
macierzysty wodorek:		azulen
sfunkcjonalizowany macierzysty wodorek		kwas azuleno-2-karboksylowy
przedrostek nasycenia:	−H	dihydro
podstawnik:	−Br	bromo

Wraz z innymi regułami powyższa analiza prowadzi do preferowanej nazwy IUPAC:

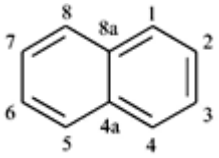
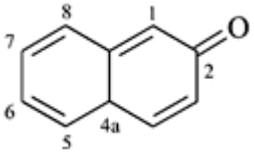
kwas 7-bromo-5,6-dihydroazuleno-2-karboksylowy (PIN)

P-59.2.3.3 Nazwy mancude ketonów, imin i innych grup charakterystycznych oraz wolnych walencyjności takich jak ‘yliden’ tworzy się metodą ‘dodanego wskazanego atomu wodoru’. Jeżeli istnieje możliwość wyboru, wskazane atomy wodoru mają priorytet dla niskich lokantów, a w dalszej kolejności następują przyrostki, ‘dodane wskazane atomy wodoru’ i na końcu przedrostki hydro.

Przykład 1:



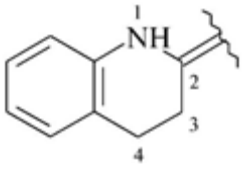
Analiza:

główna grupa charakterystyczna:	=O	-on
macierzysty wodorek		naftalen
sfunkcjonalizowany macierzysty wodorek		naftalen-2(4a*H*)-on
przedrostek nasycenia	2 −H	dihydro

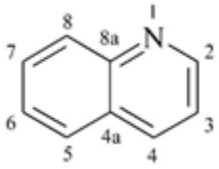
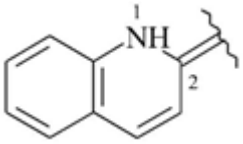
Wraz z innymi regułami powyższa analiza prowadzi do preferowanej nazwy IUPAC:

5,6,7,8-tetrahydronaftalen-2(4a*H*)-on (PIN)

Przykład 2:



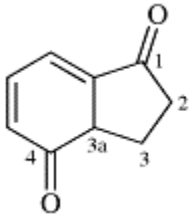
Analiza:

wolne walencyjności:	R=	yliden
macierzysty wodorek:		chinolina
macierzysty wodorek z wolnymi walencyjnościami		chinolin-2(1*H*)-yliden

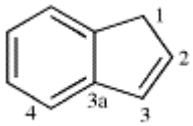
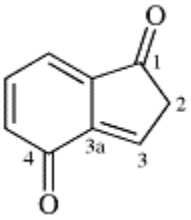
Wraz z innymi regułami powyższa analiza prowadzi do preferowanej nazwy IUPAC:

3,4-dihydrochinolin-2(1*H*)-yliden (PIN)

Przykład 3:



Analiza:

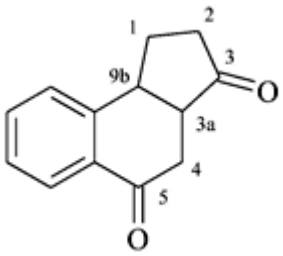
główna grupa charakterystyczna:	=O	dion
macierzysty wodorek		*1H*-inden
sfunkcjonalizowany macierzysty wodorek		1*H*-indeno-1,4(2*H*)-dion
przedrostek nasycenia	2 −H	dihydro

Wraz z innymi regułami powyższa analiza prowadzi do preferowanej nazwy IUPAC:

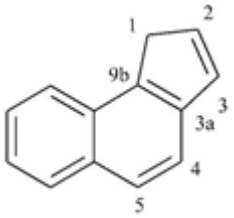
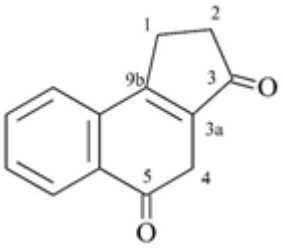
3,3a-dihydro-1*H*-indeno-1,4(2*H*)-dion (PIN)

Uwaga: Kiedy układ pierścieni staje się w pełni nasycony przez użycie przedrostków hydro, nie są wymagane żadne lokanty; patrz P-14.3.4.5

Przykład 4:



Analiza:

główna grupa charakterystyczna:	2 O=	dion
macierzysty wodorek:		1*H*-cyklopenta[*a*]naftalen
sfunkcjonalizowany macierzysty wodorek:		1*H*-cyklopenta[*a*]naftaleno-3,5(2*H*,4*H*)-dion

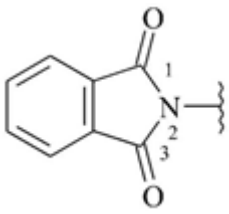
Wyjaśnienie: Patrz P-58.2.5

przedrostek nasycenia:	−H	dihydro

Wraz z innymi regułami powyższa analiza prowadzi do preferowanej nazwy IUPAC:

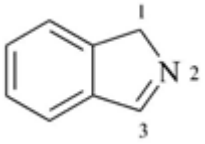
3a,9b-dihydro-3*H*-cyklopenta[*a*]naftaleno-3,5(2H)-dion (PIN)

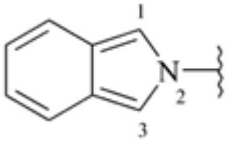
Przykład 5:



Analiza:

Wolna walencyjność:	R−	yl

macierzysty wodorek:  1*H*-izoindol

macierzysty wodorek z wolnymi walencyjnościami:  2*H*-izoindol-2-yl

przedrostek nasycenia: −H dihydro
podstawnik: =O diokso

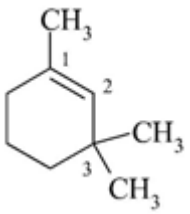
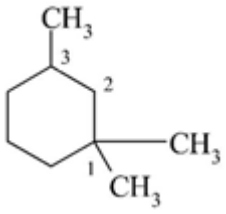
Wraz z innymi regułami powyższa analiza prowadzi do preferowanej nazwy IUPAC:

1,3-diokso-1,3-dihydro- 2*H*-izoindol-2-il (preferowany przedrostek)

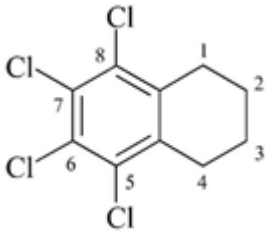
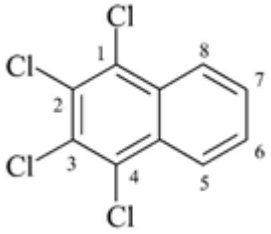
P-59.2.4 Starszeństwo końcówek ‘en’ i ‘yn’ i przedrostków hydro względem rozłącznych przedrostków.

Jeżeli istnieje możliwość wyboru, niskie lokanty przypisuje się końcówkom ‘en’ i ‘yn’ i przedrostkom ‘hydro/dehydro’a następnie, w porządku alfabetycznym, rozłącznym przedrostkom.

Przykłady:

 porównaj z 

1,3,3-trimetylocykloheks-1-en (PIN) 1,1,3-trimetylocykloheksan (PIN)

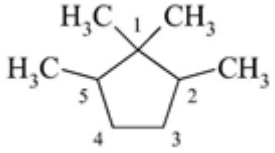
 porównaj z 

5,6,7,8-tetrachloro-1,2,3,4-tetrahydronaftalen (PIN) 1,2,3,4-tetrachloronaftalen (PIN)

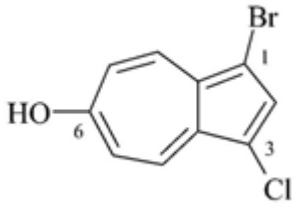
P-59.2.5 Dostosowanie przedrostków rozłącznych

Jeżeli istnieje możliwość wyboru niskie lokanty przypisuje się najpierw przyrostkom rozłącznym traktowanym wspólnie, a jeżeli istnieje dalszy wybór, w porządku alfanumerycznym.

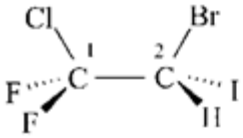
Przykłady:



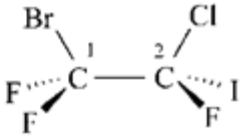
1,1,2,5-tetrametylocyklopentan (PIN)
(nie 1,2,2,3-tetrametylocyklopentan; zestaw lokantów 1,1,2,5 jest niższy niż 1,2,2,3)



1-bromo-3-chloroazulen-6-ol (PIN)



(2*R*)-2-bromo-1-chloro-1,1-difluoro-2-jodoetan (PIN)



(2*S*)-1-bromo-2-chloro-1,1,2-trifluoro-2-jodoetan (PIN)

ROZDZIAŁ P-6 ZASTOSOWANIA DO OKREŚLONYCH KLAS ZWIĄZKÓW

P-60 Wprowadzenie
P-61 Nomenklatura podstawnikowa: tryb przedrostkowy
P-62 Aminy i iminy
P-63 Związki hydroksylowe, etery, peroksole, peroksydy (nadtlenki) i analogi chalkogenowe
P-64 Ketony, pseudoketony i heterony i analogi chalkogenowe
P-65 Kwasy i ich pochodne
P-66 Amidy, hydrazydy, nitryle, aldehydy
P-67 Oksokwasy wykorzystywane jako związki macierzyste dla związków organicznych
P-68 Nomenklatura innych klas związków
P-69 Związki metaloorganiczne

P-60 WPROWADZENIE

Zalecenia opisane w tym rozdziale ilustrują w jaki sposób ogólne wskazania oraz specyficzne zasady wprowadzone w poprzednich rozdziałach zastosować do różnych typów związków.

P-60.1 PLAN TEMATYCZNY

Podrozdział 61 opisuje węglowodory, które są nazywane podstawnikowo jedynie w trybie przedrostkowym. Zawiera on i daje przykłady związków powstałych przez podstawienie macierzystego wodorku podstawnikami wywodzącymi się z innych wodorków macierzystych lub grupami charakterystycznymi, które zawsze w odniesieniu do węglowodorów wskazuje się przedrostkami.

Podrozdziały od 62 do 66 opisują związki nazywane w nomenklaturze podstawnikowej za pomocą przedrostków i przyrostków, jak również przy użyciu innych typów nomenklatury. Opisane są tu tradycyjne klasy związków od kwasów do imin (patrz P-41).

Podrozdzial 67 opisuje nomenklaturę pochodnych organicznych związków kwasów niewęglowych i ich analogów o zamiennych funkcjach.

Podrozdział P-68 zajmuje się nomenklaturą związków organicznych zawierających pierwiastki grup 13, 14, 15, 16 i 17 nie uwzględnionych w podrozdziałach 62-67.

Podrozdział P- 69 opisuje nomenklaturę związków metaloorganicznych.

P-60.2 PREZENTACJA NAZW

Nazwy opisane w tym rozdziale prezentowane są w sposób systematyczny. Metody ogólne rekomendowane do tworzenia preferowanych nazw IUPAC mogą zostać opisane w uproszczony sposób w odniesieniu do następujących pełnych opisów:

(a) nazwy tworzone podstawnikowo przy użyciu przyrostków podlegają metodom ogólnym opisanym w P-15.1. Nazwy podstawnikowe tworzy się dodając końcówki takie jak ‘al’, ‘ol’, ‘il’, ‘karboaldehyd’, ‘kwas karboksylowy’ etc. do nazwy macierzystego wodorku;

(b) nazwy tworzone podstawnikowo przy użyciu przedrostków podlegają metodom ogólnym. Nazwy podstawnikowe tworzy się przez dodanie przedrostków takich jak: amino, hydroksy, etc. do nazwy wodorku macierzystego lub związku macierzystego;

(c) nazwy tworzone przy użyciu nomenklatury klasowo-funkcyjnej podlegają metodom ogólnym opisanym w P-15.2. Nazwy klasowo-funkcyjne tworzy się wymieniając nazwę klasy przed

nazwami podstawników wymienionych w porządku alfabetycznym i oddzielonych łącznikiem jeżeli jest taka potrzeba;

(d) nazwy tworzone przy użyciu nomenklatury zamiennej szkieletu (‘a’) podlegają metodologii opisanej w P-15.4;

(e) związki o macierzystych funkcjach zostały omówione pod kątem nazw preferowanych oraz nazw, które mogą być używane w nomenklaturze ogólnej.

Określenia ‘Ta metoda prowadzi do utworzenia preferowanych nazw IUPAC’ lub ‘Metoda (1) prowadzi do preferowanych nazw IUPAC’ wskazują metody służące tworzeniu nazw preferowanych przez IUPAC. Skrót ‘PIN’ jest umieszczany po preferowanej nazwie IUPAC. Nazwy, które były zalecane w przeszłości, ale nie podlegają obecnym rekomendacjom, wskazuje określenie ‘nazwa obecnie niezalecana’ umieszczone w nawiasach. Przykładowo, przedrostek ‘metyleno’ nie jest już zalecany w nomenklaturze IUPAC dla opisu grupy $=CH_2$.

Nazwy poprzedzone zwrotem ‘nie’ są nazwami które nie zostały skonstruowane w oparciu o zasady opisane w tym rozdziale. W związku z tym są nazwami niepoprawnymi. Nie wolno ich używać ponieważ nie stanowią one alternatywy w stosunku do preferowanych nazw IUPAC. Przykładowo, nazwa ‘etanoloamina’, która jest w dalszym ciągu powszechnie używana, jest źle skonstruowana z uwagi na obecność dwóch przyrostków. Dlatego też nie stanowi ona alternatywy dla preferowanej nazwy IUPAC, która brzmi ‘2-aminoetan-1-ol’.

P-61 NOMENKLATURA PODSTAWNIKOWA: TRYB PRZEDROSTKOWY

P-61.0 Wprowadzenie
P-61.1 Metodologia ogólna
P-61.2 Grupy hydrokarbylowe i odpowiadające im grupy di- i poliwalencyjne
P-61.3 Związki zawierające halogen
P-61.4 Związki diazowe
P-61.5 Nitro- i nitrozo-pochodne
P-61.6 Heterony
P-61.7 Azydki
P-61.8 Izocyjaniany
P-61.9 Izocyjanki
P-61.10 Fulminiany/Izofulminiany
P-61.11 Związki polifunkcyjne

P-61.0 WPROWADZENIE

Ten podrozdział opisuje utworzone za pomocą nomenklatury podstawnikowej nazwy związków zawierające jedynie przedrostki wskazujące podstawniki i/lub grupy charakterystyczne. Te przedrostki są rozłączne i wymieniane w nazwie w porządku alfanumerycznym.

Grupy hydrokarbylowe i odpowiadające im grupy poliwalencyjne (grupy podstawników wywodzące się z wodorku macierzystego węglowodoru) są uwzględnione w niniejszej podsekcji ponieważ zajmują one przedostatnią pozycję w porządku starszeństwa klas (patrz P-41) i dlatego są one traktowane jak przedrostki w obecności klas starszych. Podobna sytuacja ma miejsce dla halogenków o standardowej wiązalności, które zajmują ostatnie miejsce w porządku starszeństwa klas.

Związki diazowe, pochodne nitro i nitrozo, azydki, izocyjaniany, izocyjanki oraz fulminiany/izofulminiany również są omówione w tej sekcji. Etery, nadtlenki i acetale nie są

natomiast tu uwzględnione, ale w dużym zakresie omówione zostały w połączeniu ze związkami hydroksylowymi i aldehydami (patrz P-63.2, P-63.3 i P-66.6.5, odpowiednio).

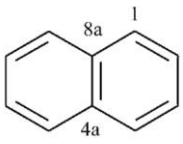
Opisane tu grupy charakterystyczne (patrz Tabela 5.1) określa się mianem ‘grup charakterystycznych wskazywanych w nomenklaturze podstawnikowej tylko przy użyciu przedrostków’ (patrz R-4.1, odnośnik 2). Tego stwierdzenia nie należy interpretować jako konieczności wymieniania tych grup charakterystycznych jako przedrostków. Nomenklatura podstawnikowa opiera się bowiem o system starszeństwa klas. Najpierw trzeba zatem określić, która grupa jest starsza (dla przykładu patrz P-62.4).

P-61.1 METODOLOGIA OGÓLNA

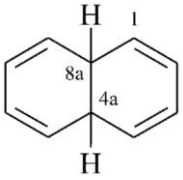
Nomenklatura podstawnikowa opiera się na operacjach podstawienia polegających na wymianie jednego lub więcej atomów wodoru macierzystego wodorku lub związku macierzystego na inny atom lub grupę. Ten proces wyrażony zostaje albo za pomocą przedrostka albo przyrostka określających wprowadzony atom lub grupę. Podstawienie nie jest możliwe jeżeli nie ma obecnych atomów wodoru. Jednakże, jeżeli atomy wodoru mogą zostać dodane do struktury na drodze operacji addytywnej (na przykład do wiązania podwójnego), staje się możliwe następcze podstawienie. Formalna addycja atomów wodoru musi poprzedzać operację podstawienia wówczas gdy zaangażowane są atomy lub grupy określane za pomocą przedrostków. W takich przypadkach dodane atomy wodoru wymienia się po wymienionych alfabetycznie przedrostkach.

Mamy tutaj do czynienia ze zmianą w stosunku do wcześniejszych zaleceń. W obecnych zaleceniach przedrostek ‘hydro’ jest rozłączny ale nie wymieniany alfabetycznie z innymi przedrostkami podstawników. W nazwach wymienia się go bezpośrednio przed nazwą wodorku macierzystego, zaraz po przedrostkach wymienianych alfabetycznie i przed przedrostkami nierozłącznymi.

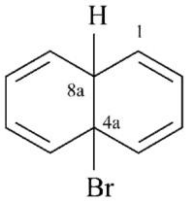
Przykłady:



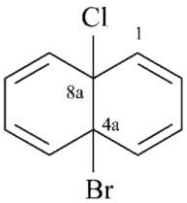
naftalen (PIN)



4a,8a-dihydronaftalen (PIN)



4a-bromo-4a,8a-dihydronaftalen (PIN)



4a-bromo-8a-chloro-4a,8a-dihydronaftalen (PIN)

Porządek starszeństwa struktur macierzystych, łańcuch główny oraz starszy układ pierścieni wybiera się zgodnie z P-44.

Jeżeli istnieje możliwość wyboru sposobu numerowania, stosuje się zasady ogólne opisane w P-14.4. Punkt początkowy oraz kierunek numerowania związku wybiera się tak aby przypisać najniższe lokanty następującym cechom strukturalnym (jeżeli są obecne) rozważanym stopniowo w podanej kolejności, aż do podjęcia ostatecznej decyzji:

(a) struktury o ustalonym numerowaniu, tak jak naftalen, bicyklo[2.2.2]oktan, etc.;
(b) heteroatomy w heterocyklach i w acyklicznych strukturach macierzystych;

> Jest to zmiana w odniesieniu do acyklicznych struktur macierzystych. Heteroatomy w łańcuchu są od teraz rozpatrywane jako fragment wodorku macierzystego i jako takie, w w kwesti numerowania, mają starszeństwo nad przyrostkami.

(c) wskazany atom wodoru [dla związków niepodstawionych wyższy lokant może być potrzebny w innej pozycji aby określić pozycję podstawnika zgodnie z cechą strukturalną (d)];
(d) grupy główne nazywane za pomocą przyrostków;
(e) wskazany dodany atom wodoru (spójny ze strukturą związku i zgodny z dalszym podstawieniem);
(f) nasycenie/nienasycenie (przedrostki hydro/dehydro) lub nienasycenie (końcówki ‘en’, ‘yn’);

> W acyklicznych strukturach macierzystych kolejność starszeństwa pomiędzy nienasyceniem, a długością łańcucha podana we wcześniejszych rekomendacjach zostaje odwrócona. Zatem pierwszym kryterium, które należy wziąć pod uwagę przy wyborze preferowanego macierzystego łańcucha acyklicznego jest jego długość, nienasycenie jest obecnie drugim kryterium.

(g) podstawniki wymieniane za pomocą przedrostków (są im przypisywane niskie lokanty niezależnie od rodzaju; następnie, jeżeli jest to konieczne, w kolejności wymieniania ich w nazwie).

P-61.2 GRUPY HYDROKARBYLOWE I ODPOWIADAJĄCE IM GRUPY DI- I POLIWALENCYJNE

W tym punkcie omówione zostaną jedynie podstawione węglowodory. Dla podstawienia innych wodorków macierzystych patrz: P-68.1 dla grupy 13, P-68.2 dla grupy 14, P-68.3 dla grupy 15, P-68.4 dla grupy 16 oraz P-68.5 dla grupy 17.

Podstawione węglowodory, dla których nazwy wodorków macierzystych są niedostępne (patrz P-2) mają nazwy składające się z nazwy wodorku macierzystego i odpowiednich przedrostków podstawnikowych wywodzących się z innych wodorków macierzystych.

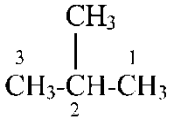
P-61.2.1 Węglowodory acykliczne

Nazwy podstawionych acyklicznych węglowodorów tworzy się podstawnikowo wybierając łańcuch główny w oparciu o P-44. Reguła ta uległa zmianie w stosunku do wcześniejszych jej wersji; obecnie starszeństwo daje się długości łańcucha, a nie nienasyceniu (patrz P-44.3).

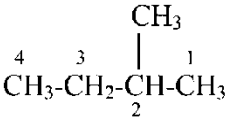
> Zmiana w stosunku do poprzednich rekomendacji polega na odwróceniu starszeństwa pomiędzy nienasyceniem, a długością łańcucha. Zatem pierwszym kryterium stosowanym przy wyborze preferowanego macierzystego łańcucha acyklicznego jest jego długość, nienasycenie jest obecnie dopiero drugim kryterium wyboru.

Nazwa ‘izopren’ zostaje zachowana, ale jej podstawienie jest niedozwolone (patrz P-31.1.2.1). Nazwy ‘izobutan’, ‘izopentan’ i ‘neopentan’ nie są już zalecane.

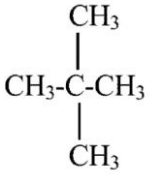
Przykłady:



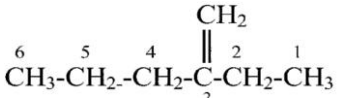
2-metylopropan (PIN)
(nie izobutan)



2-metylobutan (PIN)
(nie izopentan)



2,2-dimetylopropan (PIN)
(nie neopentan)

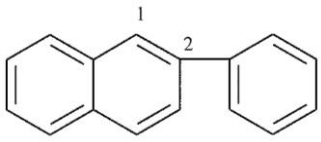


3-metylidenoheksan (PIN)
(nie 2-etylopent-1-en, dłuższy łańcuch węglowy jest obecnie ważniejszy od krótszego łańcucha nienasyconego; patrz P-44.3)

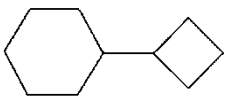
P-61.2.2 Węglowodory cykliczne

Nazwy pierścieni lub układów cyklicznych podstawionych pierścieniami lub układami pierścieni tworzy się zgodnie z porządkiem starszeństwa dla pierścieni i układów pierścieni (patrz P-44.2.1 i P-44.4.1).

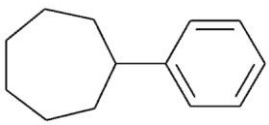
Przykłady:



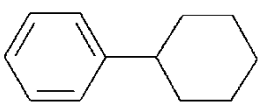
2-fenylonaftalen (PIN)
(mający dwa pierścienie naftalen jest starszy od benzenu, który ma tylko jeden pierścień, patrz P-44.2.1)



cyklobutylocykloheksan (PIN)
(cykloheksan ma więcej atomów w pierścieniu niż cyklobutan, patrz P-44.2.1)



fenylocykloheptan (PIN)
cykloheptan ma więcej atomów w pierścieniu niż (benzen, patrz P-44.2.1)



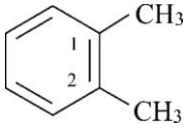
cykloheksylobenzen (PIN)
(benzen ma więcej wiązań wielokrotnych niż cykloheksan, patrz P-44.4.1)

P-61.2.3 Węglowodory składające się z pierścieni i łańcuchów

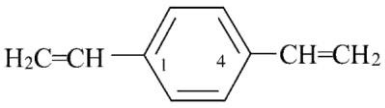
Nazwy cyklicznych węglowodorów podstawionych łańcuchami tworzy się przez podstawienie łańcuchów nasyconych bądź nienasyconych do pierścieni (patrz P-44.1.2.2). Zasada ta powinna być rygorystycznie stosowana w odniesieniu do preferowanych nazw IUPAC. Nazwa ‘toluen’ zostaje zachowana, ale jej podstawienie jest niedozwolone w preferowanych nazwach IUPAC. Jednakże podstawienie zarówno w pierścieniu jaki i łańcuchu bocznym jest możliwe z pewnymi ograniczeniami (patrz P-22.1.3) w nomenklaturze ogólnej. Nazwa ‘ksylen’ jest preferowaną nazwą IUPAC, ale nie może być podstawiana, a nazwa ‘mezytylen’ może być używana wyłącznie w nomenklaturze ogólnej i nie może być podstawiana.
Nazwy ‘styren’, ‘stilben’ i ‘fulwen’ zostają zachowane wyłącznie w nomenklaturze ogólnej. Nazwy styren i stilben mogą być podstawiane w pierścieniu zgodnie z opisem w P-15.1.8.2.2. Podstawienie nie jest dozwolone dla fulwenu (patrz P-31.1.3.4).

W Przewodniku z roku 1993 (odnośnik 2), wymienione wodorki macierzyste zostały zachowane, ale dozwolone były jedynie ograniczone podstawienia.

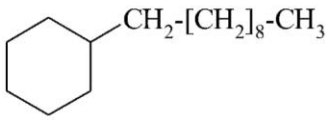
Przykłady:



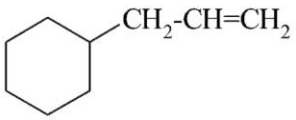
1,2-ksylen (PIN)
1,2-dimetylobenzen
(nie *o*-metylotoluen, podstawienie nazwy toluen dodatkową grupą metylową jest niedozwolone, patrz P-22.1.3)



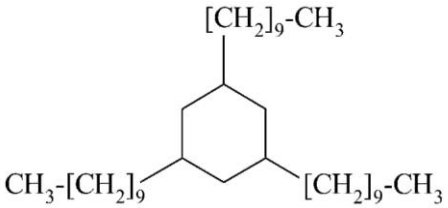
1,4-dietenylobenzen (PIN)
1,4-diwinylobenzen
nie *p*-winylostyren; podstawienie styrenu jest niedozwolone; patrz P-22.1.3)

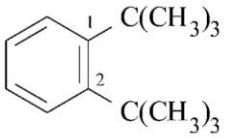


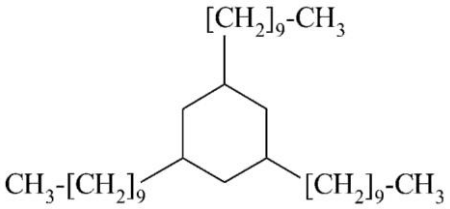
decylocykloheksan (PIN)
(pierścień preferowany przed łańcuchem, patrz P-52.2.9)
1-cykloheksylodekan



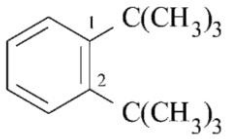
(prop-2-en-1-ylo)cykloheksan (PIN)
(pierścień preferowany przed łańcuchem, patrz P-52.2.9)
3-cykloheksyloprop-1-en
allilocykloheksan



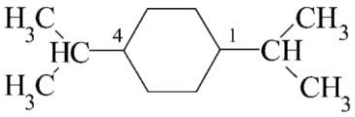




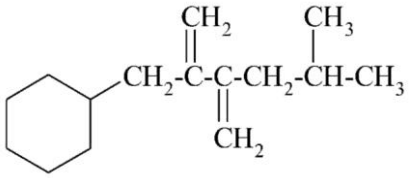
1,3,5-tri(decylo)cykloheksan (PIN)
(nie 1,3,5-tris(decylo)cykloheksan



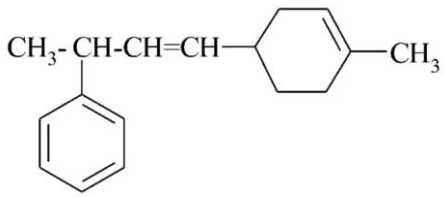
1,2-di-*tert*-butylobenzen (PIN)



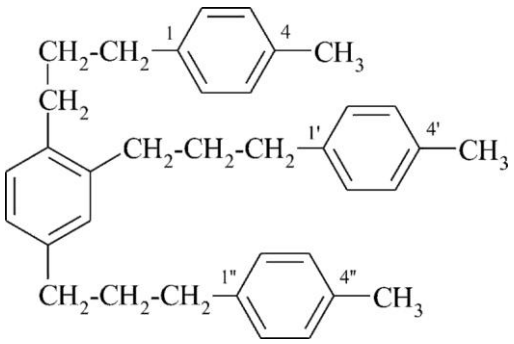
1,4-di(propan-2-ylo)cykloheksan (PIN)



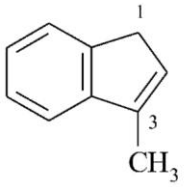
(5-metylo-2,3-dimetylidenoheksylo)cykloheksan (PIN)
(nie [2-metylideno-3-(2-metylopropylo)but-3-en-1-ylo]cykloheksan; dłuższy łańcuch preferowany w stosunku do krótszego łańcucha nienasyconego, patrz P-44.3]

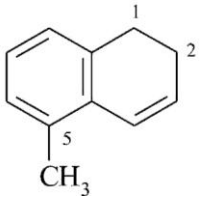


[4-(4-metylocykloheks-3-en-1-ylo)but-3-en-2-ylo]benzen [PIN; patrz P-44.3]
{nie [1-metylo-3-(4-metylocykloheks-3-en-1-ylo)prop-2-en-1-ylo]benzen; najdłuższy łańcuch jest preferowany w stosunku do krótszych łańcuchów}

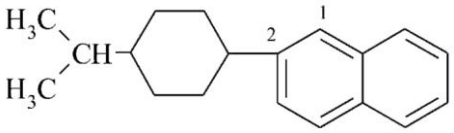


1,1′,1′′-[benzeno-1,2,4-triylotri(propano-3,1-diylo)]tris(4-metylobenzen) (PIN)
(nazwa multiplikacyjna, pokazana numeracja, patrz P-51.3)
1,2,4-tris[3-(4-metylofenylo)propylo]benzen
1,2,4-tris(3-*p*-toluilopropylo)benzen

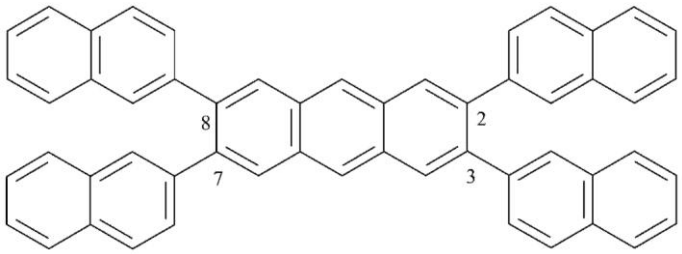




3-metylo-1*H*-inden (PIN) 5-metylo-1,2-dihydronaftalen (PIN)



2-[4-(propan-2-ylo)cykloheksylo]naftalen (PIN)
2-(4-izopropylocykloheksylo)naftalen

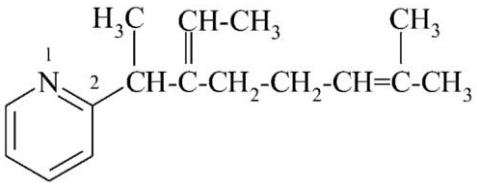


2,3,7,8-tetra(naftalen-2-ylo)antracen (PIN)

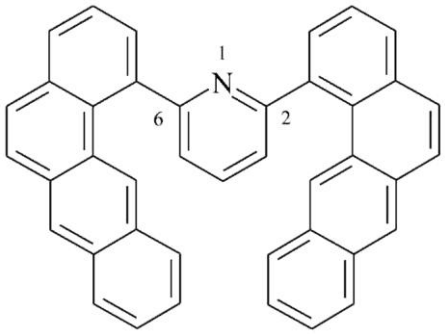
P-61.2.4 Struktury zawierające pierścienie heterocykliczne

Nazwy pierścieni heterocyklicznych lub układów pierścieni podstawionych łańcuchami lub pierścieniami lub układami pierścieni tworzy się zgodnie z porządkiem starszeństwa pierścieni lub układów pierścieni nad łańcuchami (patrz P-44.1.2.2) oraz z porządkiem starszeństwa pierścieni lub układów pierścieni (patrz P-44.2).

Przykłady:



2-(3-etylideno-7-metylookt-6-en-2-ylo)pirydyna (PIN)
(preferowane przedrostki macierzystych podstawników, patrz P-46.1)
2-(2-etylideno-1,6-dimetylohept-5-en-1-ylo)pirydyna



2,6-di(tetrafen-1-ylo)pirydyna (PIN)
2,6-bis(benzo[*a*]antracen-1-ylo)pirydyna

P-61.3 ZWIĄZKI ZAWIERAJĄCE HALOGEN

Związki zawierające halogen, w których atom halogenowca ma swoją standardową wiązalność opisuje się zawsze za pomocą przedrostków w nomenklaturze podstawnikowej lub jako główną grupę charakterystyczną lub jako oddzielne słowo w nomenklaturze klasowo-funkcyjnej.

P-61.3.1 Związki zawierające halogen, w których atom halogenowca ma swoją standardową wiązalność można nazywać na dwa sposoby:

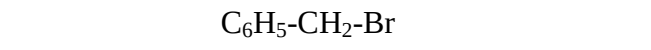
(1) przy użyciu nomenklatury podstawnikowej, stosując przedrostki ‘bromo’, ‘chloro’, ‘fluoro’ i ‘jodo’ i gdy jest to wymagane, odpowiednie przedrostki multiplikacyjne;

(2) przy użyciu nomenklatury klasowo-funkcyjnej w której nazwy są tworzone przez podanie nazwy klasy ‘fluorek’, ‘chlorek’, ‘bromek’ lub ‘jodek’ jako oddzielnego słowa poprzedzonego, jeżeli potrzeba, przedrostkiem multiplikacyjnym, a następnie nazwy ‘grupy’ organicznej. Nazwy klasowo-funkcyjne stosuje się z reguły do opisu prostych struktur zawierających jeden rodzaj halogenowca i nie używa się ich do nazywania bardziej złożonych struktur. Nazwy addytywne, takie jak dibromek stilbenu, nie są zalecane.

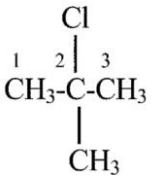
Metoda (1) prowadzi do utworzenia preferowanej nazwy IUPAC (patrz P-51.1).

Przykłady:

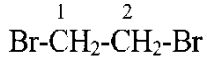
jodometan (PIN)
jodek metylu



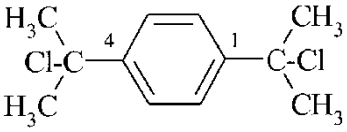
(bromometylobenzen) (PIN) (nazwa toluen jest niepodstawialna)
α-bromotoluen (zasady dotyczące podstawiania toluenu w ramach nomenklatury ogólnej, patrz P-22.1.3)
bromek benzylu



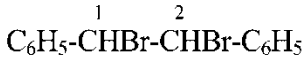
2-chloro-2-metylopropan (PIN)
chlorek *tert*-butylu



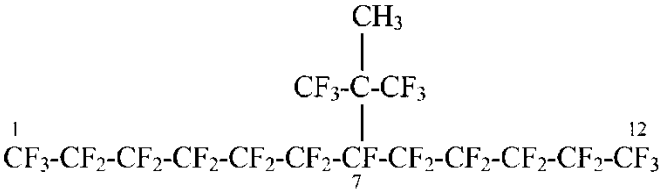
1,2-dibromoetan (PIN)
dibromek etylenu



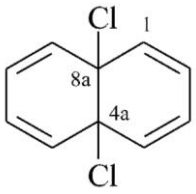
1,4-bis(2-chloropropan-2-ylo)benzen (PIN)
1,4-bis(1-chloro-1-metyloetylo)benzene



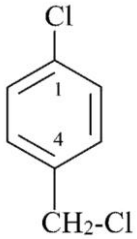
1,1′-(1,2-dibromoetano-1,2-diylo)dibenzen (PIN; nazwa multiplikacyjna, patrz P-51.3)
1,2-dibromo-1,2-difenyloetan (nazwa podstawnikowa)
(nie dibromek stilbenu)



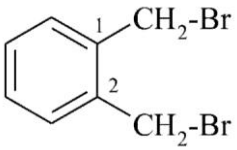
1,1,1,2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,7,8,8,9,9,10,10,11,11,12,12,12-pentakozafluoro-7-(1,1,1,3,3,3-heksafluoro-2-metylopropan-2-ylo)dodekan (PIN)
1,1,1,2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,7,8,8,9,9,10,10,11,11,12,12,12-pentakozafluoro-7-[2,2,2-trifluoro-1-metylo-1-(trifluorometylo)etylo]dodekan



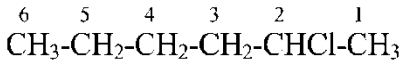
4a,8a-dichloro-4a,8a-dihydronaftalen (PIN)



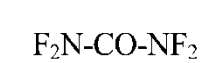
1-chloro-4-(chlorometylo)benzen (PIN)
α,4-dichlorotoluen (zasady dotyczące podstawiania toluenu w ramach nomenklatury ogólnej, patrz P-22.1.3)



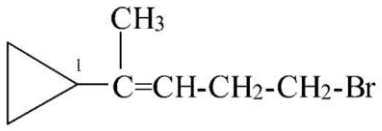
1,2-bis(bromometylo)benzen (PIN)
α-bromo-2-(bromometylo)toluen (zasady dotyczące podstawiania nazwy toluen w ramach nomenklatury ogólnej, patrz P-22.1.3)
[nie α,α’-dibromo-*o*-ksylen, podstawienie ksylenu nie jest rekomendowane]



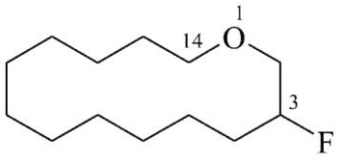
2-chloroheksan (PIN)
chlorek heksan-2-ylu
chlorek 1-metylopentylu



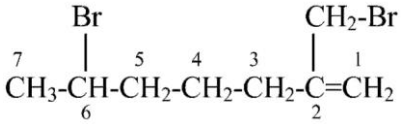
tetrafluoromocznik (PIN)
diamid tetrafluorokarbonowy



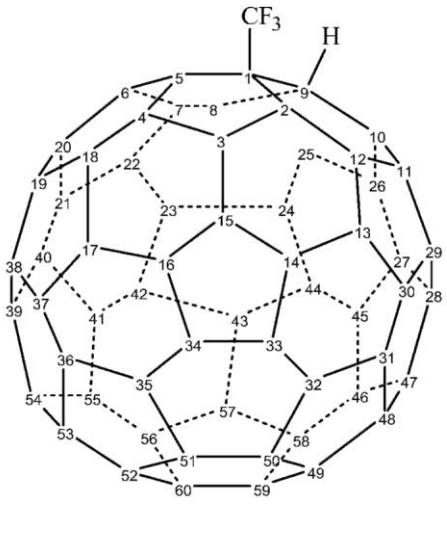
(5-bromopent-2-en-2-ylo)cyklopropan (PIN)
(preferencja pierścienia wobec łańcucha, patrz P-44.1.2.2; preferowany przedrostek podstawnika, patrz P-46.1)
(4-bromo-1-metylobut-1-en-1-ylo)cyklopropan
5-bromo-2-cyklopropylopent-2-en



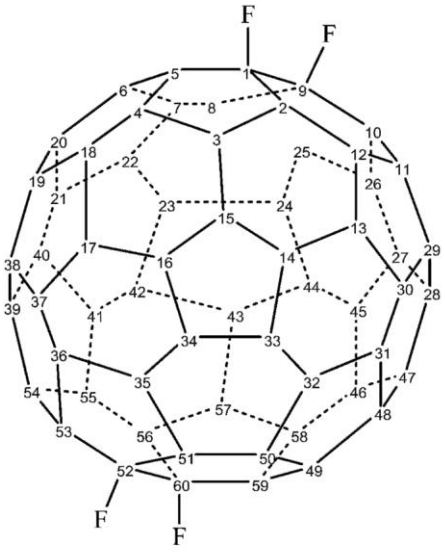
3-fluoro-1-oksacyklotetradekan (PIN)
fluorek 1-oksacyklotetradekan-3-ylu



6-bromo-2-(bromometylo)hept-1-en (PIN)
dibromek 2-metylidenoheptan-1,6-diylu

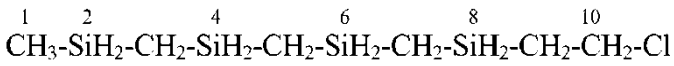


I

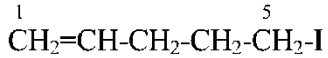


II

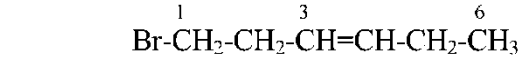
I 1-(trifluorometylo)-1,9-dihydro($C_{60}I_h$)[5,6]fulleren (PIN)
II 1,9,52,60-tetrafluoro-1,9,52,60-tetrahydro($C_{60}I_h$)[5,6]fulleren
tetrafluorek ($C_{60}I_h$)[5,6]fullereno-1,9,52,60-tetraylu



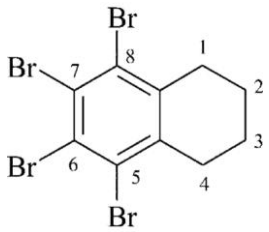
10-chloro-2,4,6,8-tetrasiladekan (PIN)
chlorek 2,4,6,8-tetrasiladekan-10-ylu



5-jodopent-1-en (PIN)
jodek pent-4-en-1-ylu



1-bromo-heks-3-en (PIN)
bromek heks-3-en-1-ylu

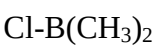


5,6,7,8-tetrabromo-1,2,3,4-tetrahydronaftalen (PIN)
tetrabromek 5,6,7,8-tetrahydronaftalen-1,2,3,4-tetraylu
(umiejscowienie przedrostków 'hydro/dehydro' w preferowanych nazwach IUPAC, patrz P-31.2.1)

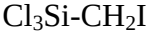
P-61.3.2 Atom halgenowca połączony z heteroatomem

P-61.3.2.1 W P-61.3.1 omówione zostały związki, w których atomy halogenowca o standardowej wiązalności są połączone z atomami węgla. Atomy halogenowca mogą jednak zostać również połączone z heteroatomami. Przedrostki 'bromo', 'chloro', 'fluoro' i 'jodo' są wykorzystywane do nazywania związków zawierających halogen w których atomy halogenowca są połączone z B, Al, In, Ga, Tl, Si, Ge, Sn, Pb i Bi.

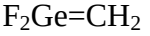
Przykłady:



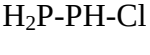
chloro(dimetylo)boran (PIN; boran jest wstępnie wybraną nazwą; patrz P-12.2)
chlorek dimetyloboranylu



trichloro(jodometylo)silan (PIN; silan jest wstępnie wybraną nazwą; patrz P-12.2)



difluoro(metylideno)german (PIN; german jest wstępnie wybraną nazwą; patrz P-12.2)



chlorodifosfan (PIN; difosfan jest wstępnie wybraną nazwą; patrz P-12.2)

P-61.3.2.2 Przy nazywaniu jakiekolwiek związku, jego klasa i starszeństwo muszą zostać określone w oparciu o starszeństwo klas opisane w P-41.1. Przyłączenie atomu halogenowca do atomów azotu generuje amidy kwasów nieorganicznych które są starsze od halo-związków opisanych

w P-61.3.1 i P-61.3.2. Podobnie, z utworzeniem halogenków kwasowych lub estrów kwasów nieorganicznych możemy mieć do czynienia w przypadku przyłączenia atomu halogenowca do atomu fosforu lub atomu chalkogenowca. W takich przypadkach nazwy muszą opierać się na starszeństwie klas, niektóre nazwy które były zalecane w poprzednich rekomendacjach mogą ciągle być używane w nomenklaturze ogólnej.

Przykłady:

CH_3-NH-Cl

amid *N*-metylohypochlorawy (PIN, patrz P-67.1.2.6)
N-chlorometyloamina

CH_3-PH-Cl

chlorek metylofosfinawy (PIN, patrz P-67.1.2.5)
chloro(metylo)fosfan

CH_3-S-Cl

tiohypochloryn metylu (PIN, patrz P-67.1.3)

P-61.3.2.3 Związki zawierające grupy –XO, -XO_2 lub –XO_3 (X = halogen) są wyrażane za pomocą następujących przedrostków obowiązujących w nomenklaturze podstawnikowej:

–XO chlorozyl (już nie chlorozo), bromozyl, jodozyl, fluorozyl
–XO_2 chloryl (już nie chloroksy), bromyl, jodyl, fluoryl
–XO_3 perchloryl, perbromyl, perjodyl, perfluoryl

Przykłady:

C_6H_5-ClO_3 C_6H_5-IO

perchlorylobenzen (PIN) jodozylobenzen (PIN)

P-61.3.3 Związki zawierające ugrupowanie –$I(OH)_2$ lub grupy podobne nazywa się podstawnikowo przy użyciu przedrostków opartych na wstępnie wybranej nazwie wodorku macierzystego 'λ^3–jodan' (patrz P-21.1.2.1 i P-68.5.1).

P-61.3.4 Nazwy zachowane

Akceptowalne w nomenklaturze ogólnej są następujące nazwy zachowane 'bromoform' dla $HCBr_3$, 'chloroform' dla $HCCl_3$ i 'jodoform' dla $HCCI_3$. Preferowanymi nazwami IUPAC są nazwy podstawnikowe.

Przykład:

$HCBr_3$

bromoform
tribromometan (PIN)

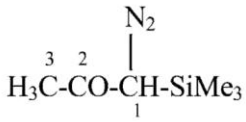
P-61.4 ZWIĄZKI DIAZOWE

Związki zawierające ugrupowanie $=N_2$ przyłączone do pojedynczego atomu węgla nazywa się poprzez dodanie przedrostka ‘diazo-’ do nazwy wodorku macierzystego albo wodorku o macierzystych funkcjach (patrz P-74.2.2.2.5).

Przykłady:

CH_2N_2 $N_2CH\text{-}CO\text{-}O\text{-}C_2H_5$

diazometan (PIN) diazooctan etylu (PIN)



1-diazo-1-(trimetylosililo)propan-2-on (PIN)
1-diazo-1-(trimetylosililo)aceton

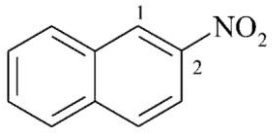
P-61.5 NITRO- I NITROZO-POCHODNE

P-61.5.1 Nitro- i nitrozo- pochodne

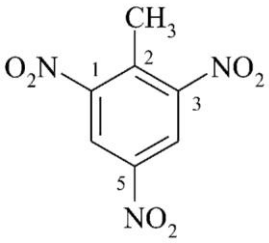
Związki zawierające ugrupowanie $-NO_2$ lub –NO nazywa się stosując przedrostki, odpowiednio, ‘nitro’ i ‘nitrozo’, chyba że grupy te można nazwać na podstawie macierzystych struktur azotowego i azotawego, odpowiednio NO_2-OH i NO-OH, lub odpowiadających im estrów, bezwodników, amidów i hydrazydów. Pochodne kwasów azotowego i azotawego zostały opisane w P-67. Halogenki kwasowe i pseudohalogenki zostały opisane w P-67.1.2.5; amidy i hydrazydy w P-67.1.2.6; sole, estry i bezwodniki w P-67.1.3.

Przykłady:

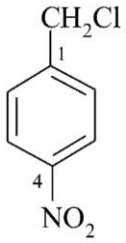
$CH_3\text{-}NO_2$ nitrometan (PIN)



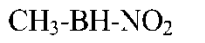
2-nitronaftalen (PIN) 1,4-dinitrozobenzen (PIN)



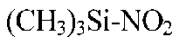
2-metylo-1,3,5-trinitrobenzen (PIN)
2,4,6-trinitrotoluen (zasady podstawiania toluenu w nomenklaturze ogólnej, patrz P-22.1.3)



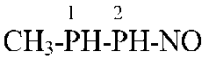
1-(chlorometylo)-4-nitrobenzen (PIN)
α-chloro-4-nitrotoluen (zasady podstawiania toluenu w nomenklaturze ogólnej, patrz P-22.1.3)
chlorek 4-nitrobenzylu



metylo(nitro)boran (PIN)



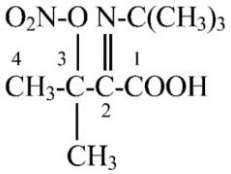
trimetylo(nitrozo)silan (PIN)



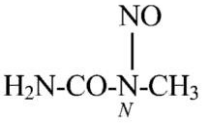
1-metylo-2-nitrozodifosfan

P-61.5.2 W obecności grup charakterystycznych posiadających starszeństwo do nazywania ich przy użyciu przyrostków lub struktur macierzystych, grupy nitrowa i nitrozowa mogą być przyłączone do dowolnego atomu. W przypadku połączenia z kolejnym atomem azotu nie przedłużają one łańcucha azotowego.

Przykłady:



kwas 2-(*tert*-butyloimino)-3-metylo-3-(nitrooksy)butanowy



N-metylo-*N*-nitrozomocznik (PIN)

P-61.5.3 *aci*-Nitro-związki

Związki zawierające ugrupowanie =N(O)OH nazywa się jako pochodne kwasu azynowego, $H_2N(O)$-OH, nazwa wstępnie wybrana, albo stosując przedrostek nazwy hydroksy(okso)-λ^5-anylideno w przypadku gdy obecna jest grupa charakterystyczna mająca pierwszeństwo przy wymienianiu jako przyrostek. Przedrostek *aci*-nitro może być wykorzystywany w nomenklaturze ogólnej (patrz P-67.1.6).

Przykład:

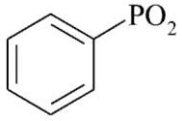
CH_3-CH=N(O)-OH — kwas etylidenoazynowy (PIN)
aci-nitroetan

P-61.6 Heterony

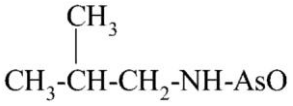
Związki zawierające ugrupowania –PO, -PO_2, -AsO lub –AsO_2 nazywane są heteronami (patrz P-64.1.3). W obecności starszej grupy charakterystycznej opisuje się je za pomocą przedrostków ‘oksofosfanyl’, ‘diokso-λ^5-fosfanyl’, ‘oksoarsanyl’ i ‘diokso-λ^5-arsanyl’.

Uwaga: Pomimo używania od roku 1937 określenia ‘fosfo’ jako przedrostka podstawnikowego dla opisu grupy -PO_2 termin ‘fosfo’ jest powszechnie wykorzystywany w nomenklaturze biochemicznej zamiast określenia ‘fosfono’ celem wskazania grupy –P(O)$(OH)_2$ połączonej z heteroatomem, jak w fosfocholinie i 6-fosfo-D-glukozie; oraz jako wrostek opisujący diestry kwasu fosforowego jak w glicerofosfocholinie. W konsekwencji w obecnych rekomendacjach określenie ‘fosfo’ oraz równolegle określenia fosforozo, arso, arsenozo, które są ciągle wykorzystywane w nomenklaturze indeksu CAS, przestają być używane.

Przykłady:



fenylo-λ^5-fosfanodion (PIN)
diokso(fenylo)-λ^5-fosfan
(nie fosfobenzen)

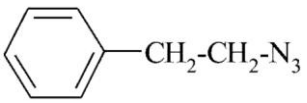


[(2-metylopropylo)amino]arsanon (PIN)
N-(2-metylopropylo)-1-oksoarsanoamina
(nie *N*-arsenozo-2-metylopropanoamina)

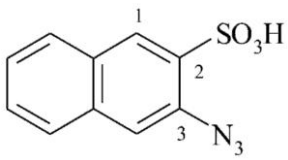
P-61.7 AZYDKI

Związki zawierające ugrupowanie –N_3 (-N=N^+=N^-) połączone z wodorkiem macierzystym nazywa się przy użyciu nomenklatury podstawnikowej i przedrostka ‘azydo’. Ta metoda prowadzi do utworzenia preferowanych nazw IUPAC, a nie nazw opartych na nazwie klasy ‘azydek’ w nomenklaturze klasowo-funkcyjnej (patrz także P-74.2.2.4).

Przykłady:



(2-azydoetylo)benzen (PIN)
azydek 2-fenyloetylu
(nie azydek fenetylu)



kwas 3-azydonaftaleno-2-sulfonowy (PIN)

P-61.8 IZOCYJANIANY

Nastąpiła zmiana w odniesieniu do wcześniejszych rekomendacji. Preferowane nazwy IUPAC tworzone są podstawnikowo przy użyciu przedrostka ‘izocyjaniano’ przyłączonego bezpośrednio do wodoru macierzystego. Poprzednio dla tej klasy związków była zalecana nomenklatura klasowo-funkcyjna.

Związki zawierające ugrupowanie –N=C=O przyłączone do struktury wodoru macierzystego nazywane podstawnikowo z użyciem przedrostka ‘izocyjaniano’. Metoda to prowadzi do preferowanych nazw IUPAC, a nie nazw opartych na nazwie klasy ‘izocyjanian’ w nomenklaturze klasowo-funkcyjnej. Analogi chalkogenowe nazywa się poprzez wstawianie wrostka zamiany funkcyjnej ‘tio’, ‘seleno’ lub ‘telluro’ do nazwy ‘izocyjanian’ lub ‘izocyjaniano’ zaraz po fragmencie ‘izo’.

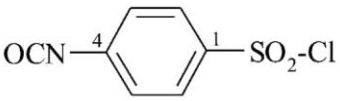
Przykłady:

C_6H_{11}-NCO

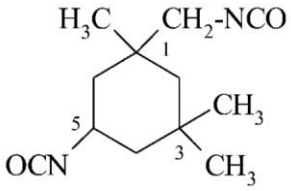
izocyjanianocykloheksan (PIN)
izocyjanian cykloheksylu

C_6H_5-NCS

izotiocyjanianobenzen (PIN)
izotiocyjanian fenylu



chlorek
4-izocyjanianobenzeno-1-sulfonylowy



5-izocyjaniano-1-(izocyjanianometylo)-1,3,3-trimetylocykloheksan (PIN)
izocyjanian 3-(izocyjanianometylo)-3,5,5-trimetylocykloheksylu (PIN)

H_3Si-NCS

izocyjanianosilan (PIN; silan jest nazwą wstępnie wybraną; patrz P-12.2)

H_2B-NCO

izocyjanianoboran (PIN; boran jest nazwą wstępnie wybraną; patrz P-12.2)

Uwaga: Zgodnie z porządkiem starszeństwa klas, grupa izocyjanianowa i jej analogi chalkogenowe tworzą pseudohalogenki kwasów jeżeli są przyłączone do centralnego atomu P, As, Sb kwasów nieorganicznych (patrz P-67.1.2.5); te pseudohalogenki kwasów mają starszeństwo nad izocyjanianami i ich analogami chalkogenowymi powstałymi przez podstawienie. Patrz także pseudoketony P- 64.3.

P-61.9 IZOCYJANKI

Nastąpiła zmiana w odniesieniu do wcześniejszych rekomendacji. Preferowane nazwy IUPAC tworzone są podstawnikowo z użyciem przedrostka ‘izocyjano’ przyłączonego bezpośrednio do wodoru macierzystego. Poprzednio dla tej klasy

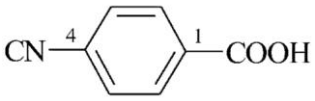
związków zalecana była nomenklatura klasowo-funkcyjna.

Związki zawierające ugrupowanie –NC przyłączone do struktury macierzystego wodorku nazywa się podstawnikowo z użyciem przedrostka ‘izocyjano’. Metoda to prowadzi do preferowanych nazw IUPAC, a nie nazw opartych na nazwie klasy ‘izocyjanek’ w nomenklaturze klasowo-funkcyjnej.

Przykłady:

C_6H_5-NC

izocyjanobenzen (PIN)
izocyjanek fenylu



kwas izocyjanobenzoesowy (PIN)

P-61.10 FULMINIANY/IZOFULMINIANY

Struktura kwasu fulminowego została pokazana w Zaleceniach z roku 1979 (reguła C-833.1, odnośnik 1) oraz w Zaleceniach z roku 1993 (reguła R-5.7.9.2, odnośnik 2) jako HO-N≡C, a jego pochodne oznaczano za pomocą nazwy klasowej fulminian oraz przedrostka fulminiano. Obecnie struktura tego kwasu w literaturze jest określana jako HCNO. W związku z tym zarówno nazwa kwas fulminowy oraz wywodząca się od niego nazwa podstawnika fulminiano, jak również nazwy kwasu izofulminowego i izofulminianu nie są akceptowane. Preferowaną nazwą IUPAC dla struktury HCNO jest oksyd formonitrylu (patrz P-66.5.1.2), a preferowana nazwa IUPAC dla jego izomeru HO-N=C jest oparta na hydroksyloaminie (patrz P-68.3.1.1.1).

Jest to odejście od potencjalnie niejednoznacznych nazw fulminian i fulminiano używanych w poprzednich zaleceniach w systematycznych nazwach podstawnikowych.

Przykłady:

H-C=NO

oksyd formonitrylu (PIN)

-C=N=O

(okso-λ^5-azanylidyno)metylo (PIN)
(nie izofulminiano)

HO-N=C

λ^2-metylidenohydroksyloamina (PIN)

-O-N=C

(λ^2-metylidenoamino)oksy (PIN)
(nie fulminiano)

P-61.11 ZWIĄZKI POLIFUNKCYJNE

W nazwach podstawnikowych, rozłączne przedrostki (z wyjątkiem przedrostków ‘hydro/dehydro’) wymienia się w porządku alfabetycznym. Niskie lokanty przypisywane są:

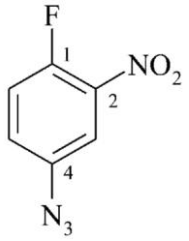
Nastąpiła zmiana w odniesieniu do wcześniejszych rekomendacji. W obecnych rekomendacjach przedrostki ‘hydro’ i ‘dehydro’ są rozłączne, ale nie są alfabetyzowalne z przedrostkami innych podstawników. W nazwach wymieniane są one bezpośrednio przed nazwą wodorku macierzystego, po przedrostkach alfabetyzowalnych, a przed przedrostkami nierozłącznymi.

(1) przedrostkom traktowanym jako zestaw, i jeżeli jest wybór,
(2) przedrostkowi wymienianemu jako pierwszy w nazwie.

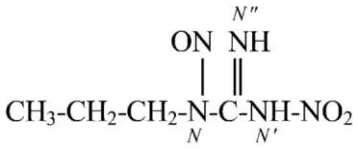
W nomenklaturze klasowo-funkcyjnej nazwy tworzy się zgodnie z kolejnością klas związków (patrz P-41) i z porządkiem starszeństwa dla halogenków i pseudohalogenków (patrz P-41 i P-65.5.2.1) przy wyborze głównej grupy charakterystycznej. Preferowanymi nazwami IUPAC są nazwy tworzone podstawnikowo, a nie nazwy klasowo-funkcyjne.

P-61.11.1 Niskie lokanty przypisywane są jako zestaw lokantów, bez względu na rodzaj.

Przykłady:



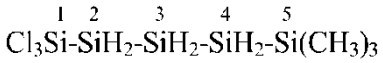
4-azydo-1-fluoro-2-nitrobenzen (PIN)
fluorek 4-azydo-2-nitrofenylu



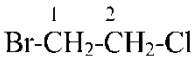
N′-nitro-*N*-nitrozo-*N*-propyloguanidyna (PIN)

P-61.11.2 Niskie lokanty przypisuje się przedrostkowi wymienianemu jako pierwszy w nazwie.

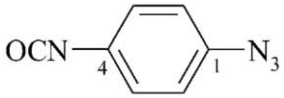
Przykłady:



1,1,1-trichloro-5,5,5-trimetylopentasilan (PIN)
(pentasilan jest nazwą wstępnie wybraną patrz P-12)



1-bromo-2-chloroetan (PIN)



1-azydo-4-izocyjanianobenzen (PIN)
azydek 4-izocyjanianofenylu

P-62 AMINY I IMINY

P-62.0 Wprowadzenie
P-62.1 Metodologia ogólna
P-62.2 Aminy
P-62.3 Iminy
P-62.4 Aminy i iminy podstawione obowiązującymi przedrostkami
P-62.5 Oksydy (tlenki) amin i imin

P-62.6 Sole amin i imin

P-62.0 WPROWADZENIE

Nomenklatura amin i imin ma bogatą tradycję i różnorodne metody używane były do tworzenia ich nazw (patrz odnośniki 1 i 2). Podejście racjonalne niezbędne do zdefiniowania preferowanych nazw IUPAC jest właściwą okazją do ugruntowania poprawnej nomenklatury amin i imin oraz zachowania jasnych i jednoznacznych metod wyboru odpowiedniego związku macierzystego i nomenklatury poszczególnych związków.

Reguły C-11.4 i C-811-C-815 z Zaleceń z roku 1979 (odnośnik 1) oraz R-5.4.1-R-5.4.3 z Zaleceń z roku 1993 (odnośnik 2) zostają unieważnione.

P-62.1 METODOLOGIA OGÓLNA

Metodologia ogólna opiera się na następujących zasadach:

(a) definicje podane w glosariuszu nazw klas opartych o strukturę (odnośnik 23) bezsprzecznie klasyfikują aminy i iminy w następujący sposób:
  (1) monoaminy są związkami formalnie wywodzącymi się z amoniaku (NH_3) powstałymi poprzez zamianę jednego, dwóch lub trzech jego atomów wodoru na jedną, dwie lub trzy grupy hydrokarbylowe przy użyciu wiązań pojedynczych, dając struktury ogólne typu R-NH_2 (aminy pierwszorzędowe), R_2NH (aminy drugorzędowe), R_3N (aminy trzeciorzędowe);
  (2) iminy są związkami o strukturze R-N=CR_2 (R = H lub hydrokarbyl) odpowiadającej albo ketiminom RR′C=NR″ albo aldiminom RCH=NR′;
(b) aminy są starsze od imin w porządku starszeństwa klas;
(c) metody nomenklatury amin i imin zostaną ograniczone do minimum, preferowane będą metody podstawnikowe stosujące przyrostki ‘amina’ i ‘imina’;
(d) nomenklatura tradycyjna zostanie ograniczone do minimum;
(e) dalsza klasyfikacja poliamin odbywa się w sposób następujący:
  (1) proste poliaminy są związkami w których wszystkie grupy aminowe są przyłączone do tego samego wodorku macierzystego;
  (2) złożone poliaminy to związki w których należy dokonać wyboru pomiędzy dwoma lub więcej wodorkami macierzystymi;

P-62.2 AMINY

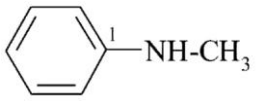
P-62.2.1 Aminy pierwszorzędowe

P-62.2.1.1 Nazwy zachowane

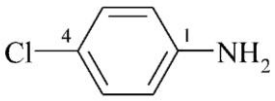
P-62.2.1.1.1 Anilina, $C_6H_5NH_2$, jest jedyną nazwą aminy pierwszorzędowej zachowaną jako preferowana nazwa IUPAC, dla której pełne podstawienie jest dozwolone w pierścieniu i na atomie azotu. Jest to nazwa zachowana Typu 2a; reguły podstawiania patrz P-15.1.8.2. Podstawienie jest ograniczone do grupy podstawników wymienianych jako przedrostki zgodnie ze starszeństwem grup funkcyjnych wyrażonym wprost lub sugerowanym w nazwie związku o macierzystych funkcjach. Nazwa benzenoamina może być używana w nomenklaturze ogólnej.

Nazwa przedrostka ‘anilino’ zostaje zachowana jako preferowany przedrostek opisujący C_6H_5-NH- z dozwolonym pełnym podstawieniem. Nazwa ‘fenyloamino’ może być używana w nomenklaturze ogólnej.

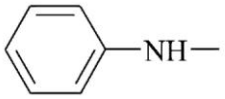
Przykłady:



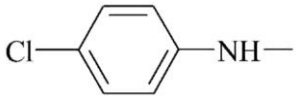
N-metyloanilina (PIN)
N-metylobenzenoamina



4-chloroanilina (PIN)
4-chlorobenzenoamina



anilino (preferowany przedrostek)
fenyloamino

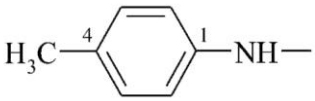


4-chloroanilino (preferowany przedrostek)
(4-chlorofenylo)amino

P-62.2.1.1.2 Nazwy ‘toluidyna’, ‘anizydyna’ i ‘fenetydyna’ dla których *o*-, *m*- i *p*- były używane dla rozróżnienia izomerów oraz ‘ksylidyna’ dla której stosowano lokanty numeryczne, takie jak 2,3-, jak również odpowiadające im przedrostki ‘toluidyno’, ‘anizydyno’, ‘fenetydyno’ i ‘ksylidyno’ nie są już zalecane.

Przykłady:

4-metyloanilina (PIN)
4-metylobenzenoamina
(nie *p*-toluidyna)



4-metyloanilino (preferowany przedrostek)
(4-metylofenylo)amino
(nie *p*-toluidyno)

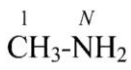
P-62.2.1.1.2 Pierwszorzędowe aminy, R-NH_2, można nazywać systematycznie w następujący sposób:

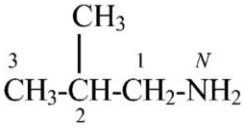
(1) dodając przyrostek ‘amina’ do nazwy wodorku macierzystego;
(2) dodając nazwę podstawnika R- do nazwy wodorku macierzystego azan;
(3) dodając nazwę podstawnika do określenia ‘amina’ używanego jako wstępnie wybrana nazwa wodorku macierzystego NH_3; metoda ta może być wykorzystywana wyłącznie dla monoamin.

Uwaga: Amina nie jest prawdziwym wstępnie wybranym wodorkiem macierzystym. W obecnych zaleceniach jest ona uważana za wodorek ‘pseudo’ macierzysty w oparciu o założenie, że metoda ta powstała jako modyfikacja nazwy klasowo-funkcyjnej opartej na nazwie klasy amina np.: amina etylu.

Metoda (1) prowadzi do utworzenia preferowanych nazw IUPAC.

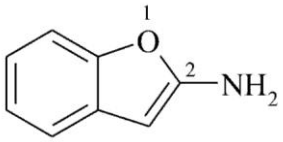
Przykłady:

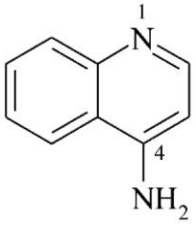




(1) metanoamina (PIN)
(2) metyloazan
(3) metyloamina

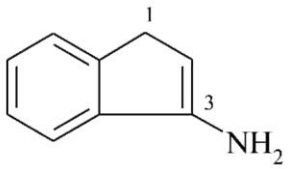
(1) 2-metylopropano-1-amina (PIN)
(2) (2-metylopropylo)azan
(3) (2-metylopropylo)amina

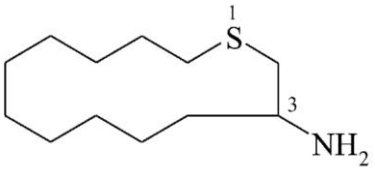




1-benzofurano-2-amina (PIN)
(1-benzofuran-2-ylo)azan
(1-benzofuran-2-ylo)amina

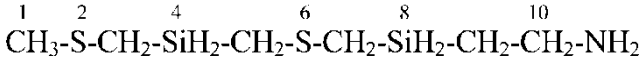
chinolino-4-amina (PIN)
(chinolin-4-ylo)azan
(chinolin-4-ylo)amina
4-chinoliloamina



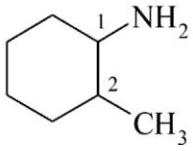


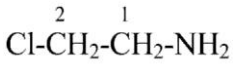
1*H*-indeno-3-amina (PIN)
(1*H*-inden-3-ylo)azan
(1*H*-inden-3-ylo)amina

1-tiacyklotridekano-3-amina (PIN)
(1-tiacyklotridekan-3-ylo)azan
(1-tiacyklotridekan-3-ylo)amina



2,6-ditia-4,8-disiladekano-10-amina (PIN)
(2,6-ditia-4,8-disiladekan-10-ylo)azan
(2,6-ditia-4,8-disiladekan-10-ylo)amina





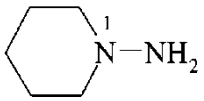
2-metylocykloheksano-1-amina (PIN)
(2-metylocykloheksylo)azan
(2-metylocykloheksylo)amina

2-chloroetano-1-amina (PIN)
(2-chloroetylo)azan
(2-chloroetylo)amina

P-62.2.1.3 Grupy aminowe i.e. -NH_2 połączone z heteroatomami

Grupy aminowe połączone z heteroatomami wskazuje się za pomocą przyrostków, jeżeli stanowią główną grupę charakterystyczną.

Przykłady:



piperydyno-1-amina (PIN)
(piperydyn-1-ylo)azan
(piperydyn-1-ylo)amina

$(CH_3)_3Si\text{-}NH_2$

1,1,1-trimetylosilanoamina (PIN)
(trimetylosililo)azan
(trimetylosililo)amina

P-62.2.2 Aminy drugo- i trzeciorzędowe

P-62.2.2.1 Symetryczne i niesymetryczne drugo- i trzeciorzędowe aminy nazywa się wyłącznie przy użyciu tych samych metod opisanych w P-62.2.1.2.

(1) podstawnikowo przy użyciu zachowanej nazwy ‘anilina’ lub przyrostka ‘amina’ i nazwy wodorku macierzystego zawierającego dalsze *N*-podstawienie;
(2) podstawnikowo dołączając jako przedrostki, wymieniane w kolejności alfabetycznej gdy konieczne, nazwy podstawników R, R′ lub R″ do nazwy wodorku macierzystego ‘azan’. W celu uniknięcia niejednoznaczności drugi przedrostek w przypadku amin drugorzędowych oraz drugi i trzeci przedrostek w przypadku amin trzeciorzędowych należy umieszczać w nawiasach gdy te przedrostki opisują proste podstawniki;
(3) podstawnikowo dołączając jako przedrostki, wymieniane w kolejności alfabetycznej gdy konieczne, nazwy podstawników R, R′ lub R″ do nazwy wodorku macierzystego ‘amina’. W celu uniknięcia niejednoznaczności drugi przedrostek w przypadku amin drugorzędowych oraz drugi i trzeci przedrostek w przypadku amin trzeciorzędowych należy umieszczać w nawiasach gdy te przedrostki opisują proste podstawniki.

Metoda (1) prowadzi do utworzenia preferowanej nazwy IUPAC. Nazwy związków o macierzystych funkcjach jak dietyloamina i trietyloamina są dezaprobowane. Przedrostki w nazwach takich drugo- i trzeciorzędowych amin tworzonych metodą (3) oddzielane są nawiasami celem odróżnienia ich od wspomnianych dezaprobowanych nazw.

Przykłady:

$C_6H_5\text{-}\overset{N}{N}H\text{-}C_6H_5$

(1) *N*-fenyloanilina (PIN)
(2) difenyloazan
(3) (difenylo)amina
(nie azanodiylobenzen; nazwa zachowana ‘anilina’ musi być używana dla wszystkich jej *N*-pochodnych)

$(CH_3\text{-}\overset{2}{C}H_2)_2\overset{N}{N}\text{-}\overset{1}{C}H_2\text{-}CH_3$

(1) *N*,*N*-dietyloetanoamina (PIN)
(2) trietyloazan
(3) (trietylo)amina

$Cl\text{-}\overset{2}{C}H_2\text{-}\overset{1}{C}H_2\text{-}\overset{N}{N}H\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}Cl$

2-chloro-*N*-(2-chloroetylo)etano-1-amina (PIN)
bis(2-chloroetylo)azan
bis(2-chloroetylo)amina
(nie 2,2′-dichlorodietyloamina)

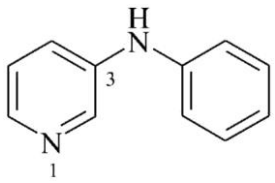
$CH_3\overset{3}{-}CH_2\overset{2}{-}CH_2\overset{1}{-}\overset{N}{N}H\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}Cl$

$CH_3\overset{4}{-}CH_2\overset{3}{-}CH_2\overset{2}{-}CH_2\overset{1}{-}\underset{N}{N}(\text{-}CH_2\text{-}CH_3)\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}CH_3$

(1) *N*-(2-chloroetylo)propano-1-amina (PIN)
(2) (2-chloroetylo)(propylo)azan
(3) (2-chloroetylo)(propylo)amina
(nie *N*-(2-chloroetylo)propyloamina)

(1)*N*-etylo-*N*-propylobutano-1-amina
(2)butylo(etylo)(propylo)azan
(3)butylo(etylo)(propylo)amina
(nie *N*-etylo-*N*-propylobutyloamina)

$H_3Si\text{-}NH\text{-}SiH_3$



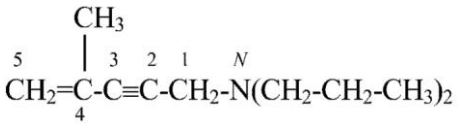
(1) *N*-sililosilanoamina
(2) disililoazan
(3) disililoamina
(nie disilazan, patrz P-21.2.3.1)

(1) *N*-fenylopirydyno-3-amina (PIN)
(2) fenylo(pirydyn-3-ylo)azan
(3) fenylo(pirydyn-3-ylo)amina
[nie *N*-(pirydyn-3-ylo)anilina]

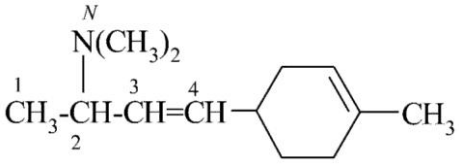
P-62.2.2.2 Wybór łańcucha głównego oraz starszego układu pierścieni w drugo- i trzeciorzędowych aminach.

Nazwy amin tworzone podstawnikowo przy użyciu zachowanej nazwy anilina lub przyrostka ‘amina’ oparte są o łańcuch główny oraz starszy układ pierścieni (patrz P-44.1). Jeżeli możliwy jest wybór wodorku macierzystego pomiędzy pierścieniem a łańcuchem, to pierścień jest preferowany. W nazwach używających określenie ‘amina’ jako wodorek macierzysty, podstawniki wyrażane jako przedrostki wymieniane są kolejności alfanumerycznej; przedrostek lub przedrostki bezpośrednio poprzedzające zwrot ‘amina’ umieszcza się w nawiasach.

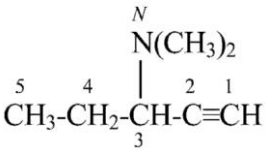
Przykłady:



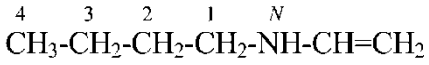
(1)4-metylo-*N*,*N*-dipropylopent-4-en-2-yno-1-amina (PIN)
(2)(4-metylopent-4-en-2-yn-1-ylo)(dipropylo)azan
(3)(4-metylopent-4-en-2-yn-1-ylo)(dipropylo)amina



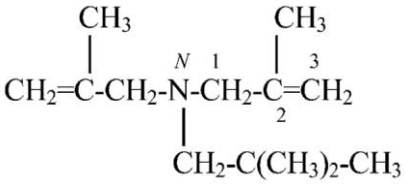
N,*N*-dimetylo-4-(4-metylocykloheks-3-en-1-ylo)but-3-eno-2-amina (PIN)
dimetylo[4-(4-metylocykloheks-3-en-1-ylo)but-3-en-2-ylo]azan
dimetylo[4-(4-metylocykloheks-3-en-1-ylo)but-3-en-2-ylo]amina



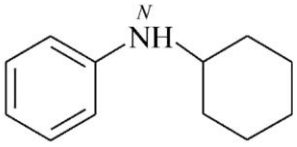
N,*N*-dimetylopent-1-yno-3-amina (PIN)
dimetylo(pent-1-yn-3-ylo)azan
dimetylo(pent-1-yn-3-ylo)amina



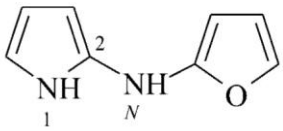
N-etenylobutano-1-amina (PIN)
butylo(etenylo)azan
butylo(etenylo)amina



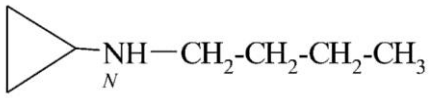
N-(2,2-dimetylopropylo)-2-metylo-*N*-(2-metyloprop-2-en-1-ylo)prop-2-eno-1-amina (PIN)
(2,2-dimetylopropylo)bis(2-metyloprop-2-en-1-ylo)azan
2,2-dimetylopropylo)bis(2-metyloprop-2-en-1-ylo)amina
[nie 2,2′-dimetylo-*N*-(2,2-dimetylopropylo)di(prop-2-eno-1-amina)



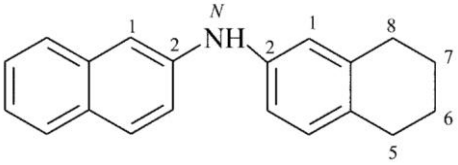
N-cykloheksyloanilina (PIN)
cykloheksylo(fenylo)azan
cykloheksylo(fenylo)amina



N-(furan-2-ylo)-1*H*-pirolo-2-amina (PIN)
(furan-2-ylo)(1*H*-pirol-2-ilo)azan
2-furylo(pirol-2-ilo)azan
(furan-2-ylo)(1*H*-pirol-2-ilo)amina
2-furylo(pirol-2-ilo)amina



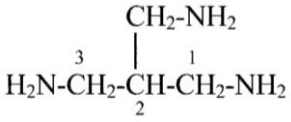
N-butylocyklopropanoamina (PIN)
butylo(cyklopropylo)azan
N-cyklopropylobutano-1-amina
butylo(cyklopropylo)amina



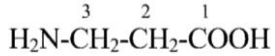
N-(5,6,7,8-tetrahydronaftaleno-2-ylo)naftaleno-2-amina (PIN)
2-naftylo(5,6,7,8-tetrahydro-2-naftylo)azan
2-naftylo(5,6,7,8-tetrahydro-2-naftylo)amina
(nie 5,6,7,8-tetrahydrodi-2-naftyloamina)

P-62.2.3 W przypadku gdy wszystkie grupy aminowe nie mogą zostać wyrażone przyrostkami lub gdy grupa $–NH_2$ nie jest główną grupą charakterystyczną, w preferowanych nazwach IUPAC używa się przedrostka ‘amino’. Przedrostek azanylo może być wykorzystywany w nomenklaturze ogólnej. Przedrostkowa nazwa podstawnika ‘anilino’ jest przedrostkiem preferowanym przez IUPAC, a jego podstawianie jest dozwolone (patrz P-62.2.1.1.1).

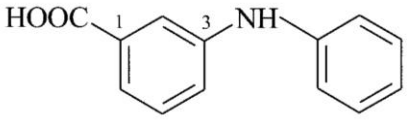
Przykłady:



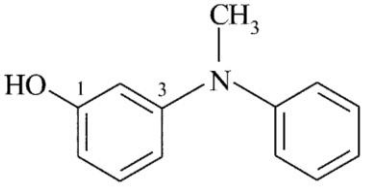
2-(aminometylo)propano-1,3-diamina (PIN)
2-(azanylometylo)propano-1,3-diamina



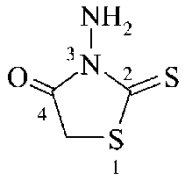
kwas 3-aminopropanowy (PIN)
kwas 3-azanylopropanowy



kwas 3-anilinobenzoesowy (PIN)
kwas 3-(fenyloamino)benzoesowy



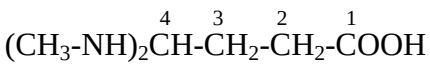
3-(*N*-metyloanilino)fenol (PIN)
3-[metylo(fenylo)amino]fenol



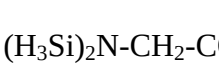
3-amino-2-sulfanylideno-1,3-tiazolidyn-4-on (PIN)
3-amino-2-tiokso-1,3-tiazolidyn-4-on
(patrz również P-64.6.1)

Preferowane nazwy IUPAC przedrostków odpowiadających grupom –NHR, NRR′ lub NR_2 tworzy się przez przedrostkowe dodanie nazw grup R i R′ do przedrostka ‘amino’ np.: ‘metyloamino’ dla $–NH-CH_3$. Przedrostki takie jak azanylo i azanylideno mogą być wykorzystywane w nomenklaturze ogólnej.

Przykłady:



kwas 4,4-bis(metyloamino)butanowy (PIN)
kwas 4,4-bis(metyloazanylo)butanowy



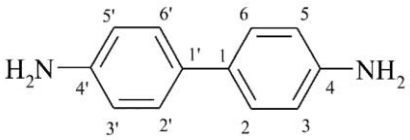
N,*N*-disililoglicyna
kwas (disililoamino)octowy
kwas (disililoazanylo)octowy
(nie kwas disilazan-2-ylo octowy)

(sililoamino)silil (preferowany przedrostek)
(sililoazanylo)silil
(nie disilazan-1-ylo)

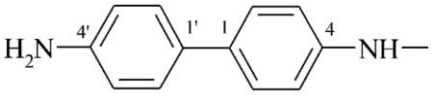
P-62.2.4 Poliaminy

P-62.2.4.1 Proste poliaminy tj. związki w których wszystkie grupy aminowe są przyłączone do tego samego wodorku macierzystego.

P-62.2.4.1.1 Nie istnieją nazwy zachowane dla prostych poliamin, które używane są jako nazwy preferowane przez IUPAC. Jednakże, w nomenklaturze ogólnej nazwa ‘benzydyna’ może być wykorzystywana, ale wyłącznie w odniesieniu do izomeru 4,4′, z podstawieniem dozwolonym zgodnie z opisem w P-15.1.8.2 dla nazw zachowanych Typu 2. Przedrostek ‘benzydyno’ zostaje zachowany z pełnym podstawieniem.

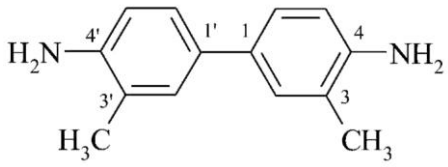


benzydyna
[1,1′-bifenylo]-4,4′-diamina (PIN)



benzydyno
[(4′-amino[1,1′-bifenyl]-4-ylo)amino]
preferowany przedrostek

Przykład:

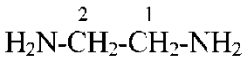


3,3′-dimetylobenzydyna
3,3′-dimetylo[1,1′-bifenylo]-4,4′-diamina (PIN)

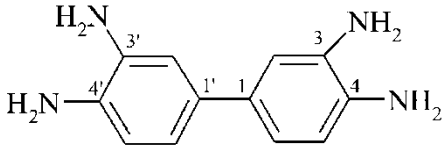
Di- i triaminy etc. nazywa się podobnie do monoamin. Lokant macierzystego wodorku do którego przyłączony został atom azotu wymienia się w indeksie górnym lokantu literowego *N* np.: N^2, N^5, etc..

P-62.2.4.1.2 Dwie lub więcej grup aminowych przyłączonych do tego samego wodorku macierzystego wskazuje się za pomocą odpowiedniego zwielokrotniającego przedrostka numerycznego ‘di’, ‘tri’, ‘tetra’. W przypadku amin wywodzących się z mononuklearnych wodorków macierzystych lokanty numeryczne, włączając lokant ‘1’, wykorzystuje się do oznaczenia podstawienia na atomach macierzystego wodorku, a lokanty ‘*N*’ dla podstawienia na atomie azotu dla amin nazywanych za pomocą metody (1). Metoda (2) używana jest wyłącznie dla monoamin.

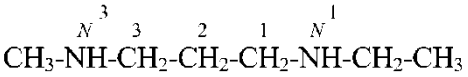
Przykłady:



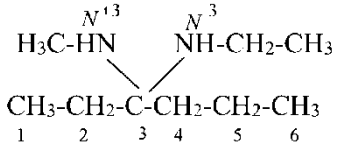
etano-1,2-diamina (PIN)
etylenodiamina



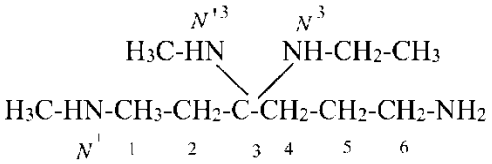
[1,1′-bifenylo]-3,3′,4,4′-tetraamina (PIN;



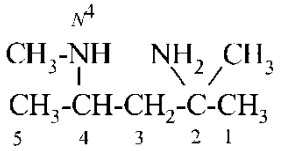
N^1-etylo-N^3-metylopropano-1,3-diamina (PIN)



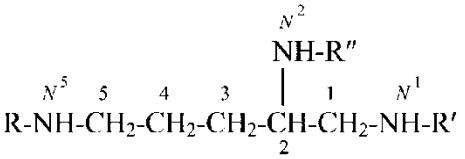
N^3-etylo-N'^3-metyloheksano-3,3-diamina (PIN)



N^3-etylo-N^1,N'^3-dimetyloheksano-1,3,3,6-tetraamina (PIN)



N^4,2-dimetylopentano-2,4-diamina (PIN)



R = R′ = R″ = H pentano-1,2,5-triamina (PIN)

R = R′ = H
R″ = -CH_3 N^2-metylopentano-1,2,5-triamina (PIN)

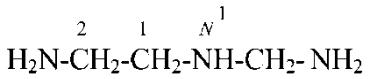
R = H; R′ = -CH_3;
R″ = -CH_2-CH_3 N^2-etylo-N^1-metylopentano-1,2,5-triamina (PIN)

P-62.2.4.1.3 Złożone poliaminy i.e. związki dla których należy dokonać wyboru pomiędzy dwoma lub więcej wodorkami macierzystymi, są układami składającymi się z dwóch lub więcej drugo- i/lub trzeciorzędowych amin.

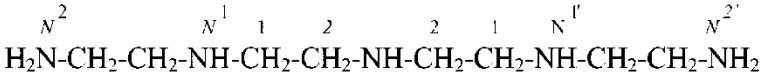
W złożonych poliaminach należy wybrać starszą strukturę macierzystej aminy. Strukturę starszej macierzystej aminy wybiera się zgodnie z zasadami wyboru łańcucha głównego lub starszego

pierścienia lub układu pierścieni opisanych w P-44 lub preferowana nazwa IUPAC musi zostać wybrana zgodnie z P-45. Jeżeli zachodzi taka konieczność stosuje się porządek alfanumeryczny. Nomenklaturę multiplikacyjną, nomenklaturę zamienną szkieletu (‘a’) lub nomenklaturę fanową stosuje się gdy spełnione są warunki stawiane przez poszczególne typy nomenklatur.

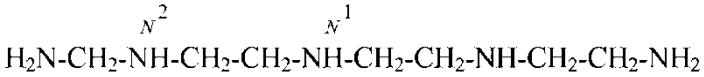
Przykłady:



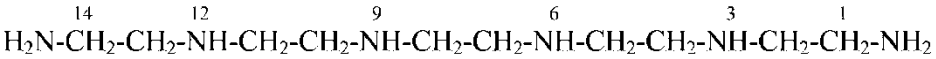
N^1-aminometylo)etano-1,2-diamina (PIN)
[regularna nomenklatura podstawnikowa, diamina posiadająca najdłuższy łańcuch węglowy została wybrana jako struktura macierzysta, patrz P-44.3]



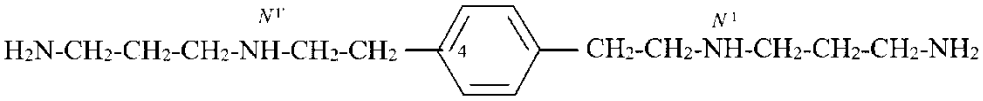
N^1,*N*$^{1\prime}$-(azanodiylodietano-2,1-diylo)di(etano-1,2-diamina) (PIN; strukturą macierzystą jest diamina, a nomenklatura multiplikacyjna (patrz P-14.3; P-51.2; P-62.4) pozwala na umieszczenie w nazwie czterech charakterystycznych grup aminowych; numeracja pokazana)
N^1-(2-aminoetylo)-*N*^{2}-{2-[(2-aminoetylo)amino]etylo}etano-1,2-diamina
(nazwa podstawnikowa)
N^1-(2-aminoetylo)-*N*^{2}-{2-[(aminometylo)amino]etylo}etano-1,2-diamina ; (nazwa podstawnikowa; alfabetycznie gorsza niż pierwsza nazwa podstawnikowa) [nie 2′-azanodiylo bis [*N*-(2-aminoetylo)etano-1-amina] [nazwa podstawnikowa; nawet w nomenklaturze ogólnej diamina musi być strukturą macierzystą; etanoamina nie jest monoaminą]



N^1-{2-[(2-aminoetylo)amino]etylo}-*N*^{2}-(aminometylo)etano-1,2-diamina (PIN)
[nie *N*^{1}-(aminometylo)-*N*^{2}-{2-[(2-aminoetylo)amino]etylo}etano-1,2-diamina; ‘aminoetylo’ poprzedza ‘aminometylo’ w porządku alfanumerycznym; P-45.1.3]
[nie *N*^{1}-(2-aminoetylo)-*N*^{2}-(aminometylo)-2,2′-azanodiylodi(etano-1-amina); preferowaną nazwą IUPAC musi być diamina]

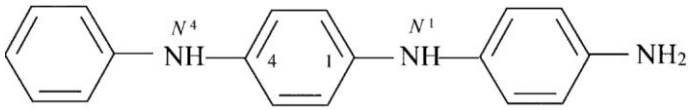


3,6,9,12-tetraazatetradekano-1,14-diamina (PIN)
(nazwa zamienna (‘a’); szkieletu patrz P-15.4)
N^1,*N*^{2}-{2-[(2-aminoetylo)amino]etylo}etano-1,2-diamina
(nazwa podstawnikowa)

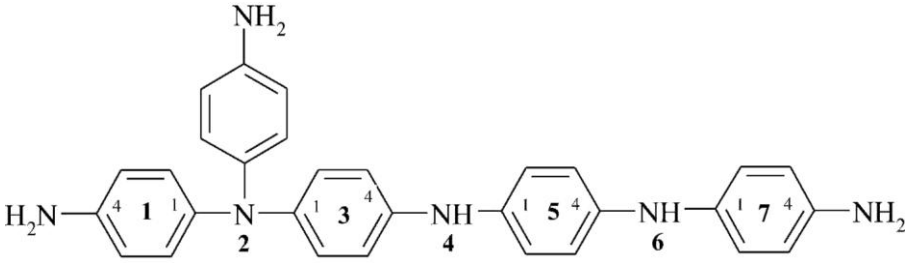


N^1,*N*$^{1\prime}$-[1,4-fenylenodi(etano-2,1-diylo)di(propano-1,3-diamina) (PIN; nomenklatura multiplikacyjna (patrz P-14.3; P-51.2; P-62.4) pozwala na umieszczenie czterech

charakterystycznych grup aminowych w nazwie)



N^1-(4-aminofenylo)-N^4-fenylobenzeno-1,4-diamina (PIN)
(maksymalna liczba podstawników wymienionych jako przedrostki, patrz P-45.2.1)
[nie N^1-(4-anilinofenylo)benzeno-1,4-diamina]

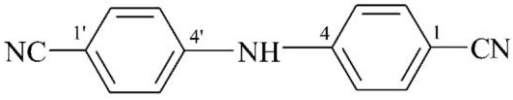


2-(4-aminofenylo)-2,4,6-triaza-1,7(1),3,5(1,4)tetrabenzenaheptafano-1^4,7^4-diamina (PIN)
(cztery pierścienie benzenowe i obecność siedmiu węzłów fanowych tłumaczy nazwę fanową; patrz P-52.2.5)
N^1,N^1-bis(4-aminofenylo)-N^4-{4-[(4-aminofenylo)amino]fenylo}benzeno-1,4-diamina
(preferowana nazwa podstawnikowa; maksymalna liczba przedrostków podstawnikowych)
N^1-(4-aminofenylo)-N^1,$N^{1'}$-(azanodiylodi-1,4-fenyleno)di(benzeno-1,4-diamina)
(nazwa multiplikacyjna; do stosowania wyłącznie w nomenklaturze ogólnej)

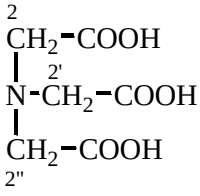
P-62.2.5 Nomenklatura multiplikacyjna

P-62.2.5.1 Zaleca się się stosowanie przedrostków ‘nitrylo’ dla –N< i ‘azanodiylo’ dla -NH- (również zapisywane jako HN<) w nomenklaturze multiplikacyjnej (patrz P-15.3). Przedrostek ‘imino’ jest zarezerwowany do oznaczania jedynie diwalencyjnych podstawników =NH. Nazwy multiplikacyjne są preferowane względem tworzonych przy użyciu nomenklatury podstawnikowej jeżeli spełnione są wszystkie wymogi do stosowania nomenklatury multiplikacyjnej (patrz P-51.3).

Przykłady:



4,4′-azanodiylodibenzonitryl (PIN)
4-[(4-cyjanofenylo)amino]benzonitryl



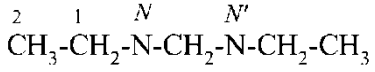
kwas 2,2′,2′′-nitrylotrioctowy (PIN)
N,*N*-bis(karboksymetylo)glicyna

P-62.2.5.2 Lokanty przy atomach azotu w identycznych strukturach macierzystych

Wykorzystanie primowania pisanej kursywą litery *N* w celu zróżnicowania różnych atomów azotu struktury macierzystej wymaga specjalnych metod pozwalających na wskazanie przyłączenia identycznych struktur macierzystych do zwielokrotniającego podstawnika przez atom azotu.

(1) Zwielokrotnione struktury macierzyste zawierające jeden atom azotu. Atomy azotu przyłączone do centralnego podstawnika oznacza się symbolami *N*, *N*′, *N*′′′ etc.

Przykład:

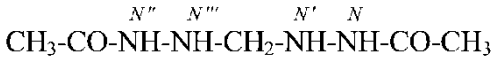


N,*N*-dietylometanodiamina (PIN)
N,*N*′-metylenodi(etano-1-amina)

(2) Zwielokrotnione struktury macierzyste zawierające dwa atomy azotu.

(i) Symbole *N*,*N*′ wykorzystywane są w przypadku ‘nieprimowanych’ struktur macierzystych, a *N*′,*N*′′′ dla ‘primowanych struktur macierzystych’.

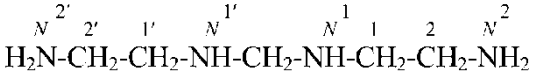
Przykład:



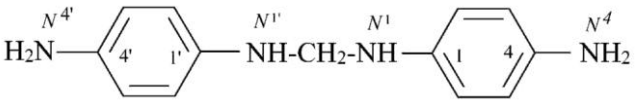
N′,*N*′′′-metylenodiacetohydrazyd (PIN)

(ii) Jeżeli istnieje potrzeba, stosuje się połączenie numerycznych lokantów nieprimowanych i primowanych z lokantami literowymi (patrz P-16.9.3). Lokanty numeryczne wskazujące pozycję przyłączenia atomu azotu w strukturze macierzystej wymienia się w indeksie górnym lokantu literowego, np.: N^1, $N^{1'}$ etc. Druga identyczna struktura macierzysta zawiera lokanty primowane tj. 1′,2′…, zatem lokant azotowy to $N^{1'}$.

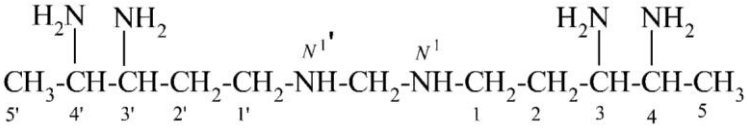
Przykłady:



N^1,$N^{1'}$-metylenodi(etano-1,2-diamina) (PIN)



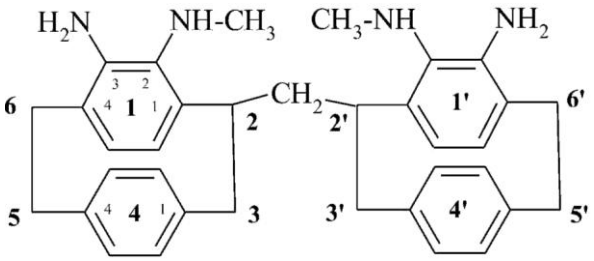
N^1,$N^{1'}$-metylenodi(benzeno-1,4-diamina) (PIN)



N^1,$N^{1'}$-metylenodi(pentano-1,3,4-triamina) (PIN)

P-62.2.5.3 Dla struktur macierzystych z kilkoma atomami azotu, takimi jak di- lub trikarboksyimidoamidy (patrz P-66.4) i cyklofanoaminy, wymagane są jeszcze bardziej skomplikowane struktury lokantów. W takich przypadkach stosuje się primowane lokanty literowe z liczbami w indeksie górnym lub z liczbami w indeksie górnym liczb w indeksie górnym.

Przykład:



2,2′-metylenobis[N^1-metylo-1,4(1,4)dibenzenacykloheksafano-1^2,1^3-diamina] (PIN)

P-62.2.6 Zmiany stopnia nasycenia/nienasycenia amin

P-62.2.6.1 Metodologia ogólna

Jeżeli istnieje wybór sposobu numeracji to punkt początkowy i kierunek numerowania związku wybiera się w taki sposób aby najniższy lokant przypisać następującym cechom strukturalnym (jeżeli są obecne) rozważanym stopniowo w podanej kolejności aż do podjęcia ostatecznej decyzji (patrz także P-14.4)

(a) ściśle określone numerowanie (naftalen, bicyklo[2.2.2]oktan, etc.);
(b) heteroatomy w heterocyklach i w acyklicznych strukturach macierzystych;
(c) wskazany atom wodoru [dla związków niepodstawionych; wyższy lokant może być potrzebny w innej pozycji aby określić pozycję podstawnika zgodnie z cechą strukturalną (d)];
(d) grupa główna wskazywana przyrostkiem;
(e) wskazany dodany atom wodoru (spójny ze strukturą związku i zgodny z dalszym podstawieniem);
(f) nasycenie/nienasycenie (przedrostki ‘hydro’/’dehydro’) lub nienasycenie (końcówki ‘en’, ‘yn’);
(g) podstawniki wskazywane przedrostkami (są im przypisywane niskie lokanty niezależnie od rodzaju; następnie, jeżeli jest to konieczne, w kolejności wymieniania ich w nazwie).

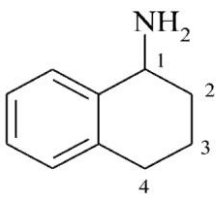
P-62.2.6.2 Modyfikacja stopnia nasycenia/nienasycenia pierwszorzędowych amin

Stosuje się kryteria (d), (e) i (f) opisane w ogólnej metodologii (P-62.2.6.1).

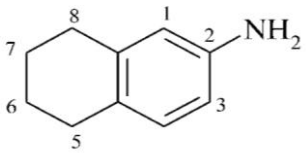
Przykłady

CH_2=CH-CH_2-NH_2

prop-2-en-1-amina (PIN)
(prop-2-en-1-yl)azan
alliloamina

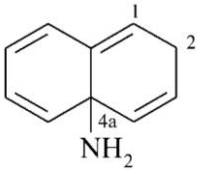


1,2,3,4-tetrahydronaftaleno-1-amina (PIN)



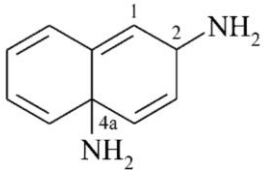
5,6,7,8-tetrahydronaftaleno-2-amina (PIN)

(1,2,3,4-tetrahydronaftalen-1-yl)azan
tetrahydronaftalen-1-yl)amina



naftaleno-4a(*2H*)-amina (PIN)
(naftaleno-4a(*2H*)-yl)azan
(naftaleno-4a(*2H*)-yl)amina

(5,6,7,8-tetrahydronaftalen-2-yl)azan (1,2,3,4-
(5,6,7,8-tetrahydronaftalen-2-yl)amina



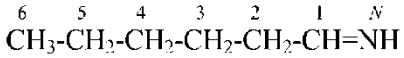
naftaleno-24a(*2H*)-diamina (PIN)
2,4a-dihydronaftaleno-2,4a-diamina
2,4a-dihydronaftaleno-4a-amina

P-62.3 IMINY

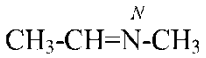
Iminy są charakteryzowane przez wiązanie podwójne pomiędzy atomem węgla i atomem azotu. Zatem, *N*-podstawione iminy, R-CH=N-R′ lub R(R′)C=N-R″, muszą być klasyfikowane jako iminy a nie jako aminy, pomimo faktu że jest pojedyncze wiązanie pomiędzy atomem węgla i atomem azotu; aminy muszą mieć trzy pojedyncze wiązania połączone z atomami węgla (patrz P-62.0). Iminy muszą mieć podwójne wiązanie pomiędzy atomem węgla i azotu. Związki posiadające ogólną strukturę R-CH=N-R′ lub R(R′)C=N-R″nazywane są ogólnie odpowiednio ‘aldiminami’ i ‘ketiminami’.

P-62.3.1 Podstawnikowe nazwy dla imin

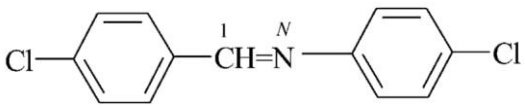
P-62.3.1.1 Wszystkie iminy nazywa się podstawnikowo używając przyrostka ‘imina’; obecność kilku ‘iminowych’ grup charakterystycznych wskazuje się liczbowymi przedrostkami zwielokrotniającymi ‘di’, ‘tri’, etc. Jeżeli jest wybór dla numeracji, metodologia opisana w P-62.2.4.1 dla amin jest zalecana do tworzenia preferowanych nazw IUPAC



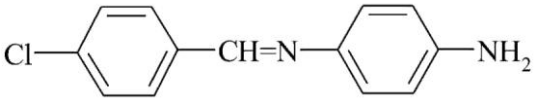
heksano-1-imina (PIN)



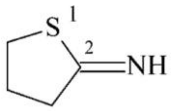
N-metyloetanoimina (PIN)
[nie *N*-etylidenometanoamina;
ani *N*-etylideno(metylo)amina]



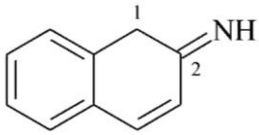
N,1-bis(4-chlorofenylo)metanoimina (PIN) (porównaj z kolejnym przykładem)



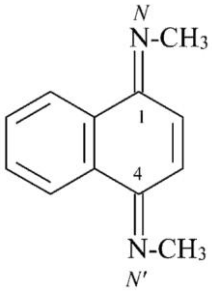
4-{[(4-chlorofenylo)metylideno]amino}anilina (PIN)



tiolano-2-imina



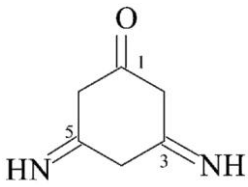
naftaleno-2(*1H*)imina (PIN)
1,2-dihydronaftaleno-2-imina (patrz P-58.2.5)



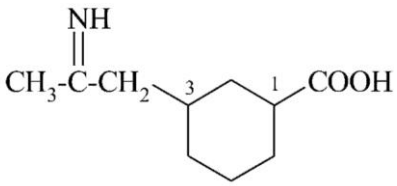
N,*N*′-dimetylonaftaleno-1,4-diimina (PIN; patrz także P-58.2.2.3)
N,*N*′-dimetylo-1,4-dihydronaftaleno-1,4-diimina
[nie diimina *N*,*N*′-dimetylo-1,4-naftochinonu;
dwa przyrostki różnych rodzajów są niezgodne]
[nie *N*,*N*′-(naftaleno-1,4-diylideno)bis(metanoamina)]
[nie *N*,*N*′-naftaleno-1,4-diylidenobis(metyloamina)]
[nie dimetylo(naftaleno-1,4-diylideno)bis(amina)]

P-62.3.1.2 Przedrostek ‘imino’ dla =NH jest używany w obecności grup charakterystycznych mających starszeństwo przed iminami. W nomenklaturze multiplikacyjnej, przedrostek ‘azanylyliden’ jest używany dla –N=. Podstawniki przyłączone do pierścieni, układów pierścieni czy heteroatomów typu R-(C=NH)-, gdzie R- jest pierścieniem lub łańcuchem są nazywane jako grupy acylowe (patrz kwasy imidowe, P-65.1.3.1 i grupy acylowe P-65.2).

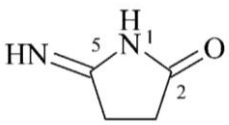
Przykłady:



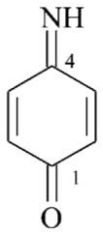
3,5-diiminocykloheksan-1-on (PIN)



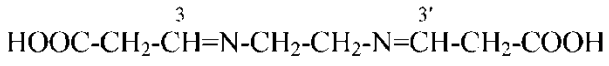
kwas 3-(2-iminopropylo)cykloheksano-1-karboksylowy (PIN)



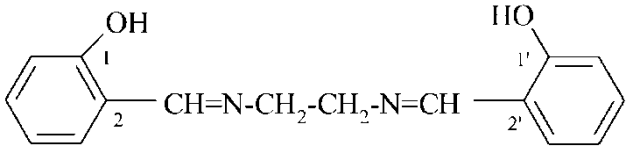
5-iminopirolid-2-on (PIN)
(nie 5-imino-2-pirolidon)



4-iminocykloheksa-2,5-dien-1-on (PIN)
(nie monoimina *p*-benzochinonu)



kwas 3,3′-[etano-1,2-diylobis(azanylylideno)]dipropanowy (PIN)



2,2′-[etano-1,2-diylobis(azanylylidenometanylylideno)]difenol (PIN)

P-62.3.1.3 Grupy iminowe przyłączone do heteroatomów (heteroiminy)

Związki zawierające grupę X=NH, gdzie X jest heteroatomem i główną grupę charakterystyczną =NH, są nazywane jako iminy; przedrostek imino jest używany do wyrażenia grupy =NH, kiedy inna grupa charakterystyczna ma starszeństwo nad iminami.

Przykłady:

CH_3-P=NH — 1-metylofosfanoimina (PIN)

$(CH_3)_2Si=N-C_6H_5$ — 1,1-dimetylo-*N*-fenylosilanoimina (PIN) (silan jest nazwą wstępnie wybraną, patrz P-12.2)

CH_3-N=SiH-CH_2-CO-O-CH_3 — metylo [(metyloimino)sililo]octan (PIN) (silil jest wstępnie wybranym przedrostkiem, patrz P-12.2)

P-62.3.1.4 Karbodiimidy

Hipotetyczny związek HN=C=NH jest nazywany systematycznie ‘metanodiimina’. Jego pochodne są nazywane jako jego produkty podstawienia. Takie nazwy są preferowane w stosunku do tych bazujących na zachowanej nazwie ‘karbodiimid’, która powinna być teraz używana tylko jako nazwa klasy.

Przykład:

C_6H_{11}-N=C=N-C_6H_{11} — dicykloheksylometanodiimina (PIN) (dawniej dicykloheksylokarbodiimid)

P-62.4 *N*-PODSTAWIENIE AMIN I IMIN PRZEZ HETEROATOMY

Tradycyjnie, podstawienie na atomie azotu amin i imin było dozwolone dla wszystkich charakterystycznych grup wymienianych jako przedrostki (patrz Tabela 5.1). To podejście jest podtrzymywane w tych zaleceniach, chyba że jest utworzona wyższa klasa, która musi być nazwana w zgodności ze starszeństwem klas (patrz P-41).

Ta nowa zasada jest stosowana do przedrostków takich jak Cl i inne atomy halogenów, -BrO i inne podobne do acylu grupy, -NO, -NO_2, -OR, -SO_2R, -SOR i nawet grupy –OH i analogi chalkogenowe.

To jest zmiana. W zgodności ze starszeństwem klas (patrz P-41), związki takie jak R-NH-Cl, R-NH-NO i R-NH-NO_2 nazywa się teraz jako pochodne amidów (patrz P-67.1.2.6). Związki takie jak R-NH-NO_2 nazywa się jako *N*-pochodne hydroksyloaminy, NH_2-OH (patrz P-68.3.1.1.1). Nazwy bazujące na *N*-podstawionych aminach nie są zalecane w tych przypadkach.

Dozwolone jest podstawienie amin przez grupy –OR, -SR, -SeR i -TeR, gdzie R jest podstawnikiem alkilowym lub arylowym.

Przykłady:

CH_3-CH_2-NH-O-CH_3

N-metoksyetanoamina (PIN, patrz P-68.3.1.1.3)

CH_3-CH_2-NH-OH

N-hydroksyetanoamina (PIN)
N-etylohydroksyloamina

CH_3-CH_2-$\overset{N}{N}$H-Cl

amid *N*-etylohypochlorawy (PIN)
N-chloroetano-1-amina

CH_3-$\overset{N}{N}$H-NO

amid *N*-metyloazotawy (PIN)
(nie *N*-nitrozometanoamina)

CH_3-N(NO_2)$_2$

N-metylo-*N*-nitronitroamid (PIN)
(nie *N*,*N*-dinitrometanoamina)

CH_3-NH-BrO

amid (*N*-metylobromawy (PIN)
(nie *N*-bromozylometanoamina)

P-62.5 OKSYDY **(**TLENKI) AMIN, OKSYDY (TLENKI) IMIN, I ANALOGI CHALKOGENOWE

Oksydy (tlenki) amin, oksydy (tlenki) imin i ich analogi chalkogenowe nazywa się:

(1) stosując nomenklaturę klas funkcyjnych i używając nazwy klasy ‘oksyd’(tlenek), ‘sulfid’, ‘selenek’ i ‘tellurek’, pod warunkiem, że jeśli jest to konieczne, mogą być użyte jednoznaczne *N* lokanty w indeksie górnym;

(2) z użyciem przedrostka pochodzącego z macierzystej nazwy λ^5-azan;

(3) jako zwitterjony (patrz P-74.2.1.2).

Metoda (1) jest używana dla oksydów (tlenków) aminy lub iminy. Z powodu zwitterjonowej natury oksydu azotu, oksydy aminy i iminy umieszczone są z zwitterjonami w szeregu klas związków (patrz P-41). W ten sposób, oksydy aminy i iminy nazywa się stosując metodę (1), a wszystkie inne grupy aminowe, jeśli obecne, nazywa się jako podstawniki z użyciem przedrostka ‘amino’. Metoda (2) jest używana kiedy tlen jest na atomie azotu podstawnika; lokant *N* jest używany przed określeniem ‘oksyd’ kiedy w nazwie aminy obecne są lokanty.

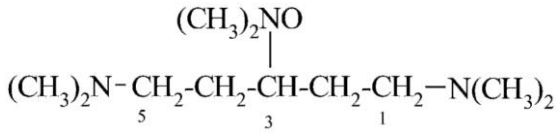
Metoda (1) albo (2) jako właściwe, prowadzą do preferowanych nazw IUPAC, jak zilustrowano poniżej. Nazwy zwitterjonów opisano w P-74.2.1.2.

Przykłady:

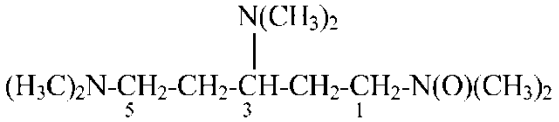
$(CH_3)_3NO$ lub $(CH_3)_3N^+$-O^-

(1) *N*-oksyd *N*,*N*-dimetylometanoaminy (PIN)
oksyd (trimetylo)aminy
(3) (trimetyloazaniumylo)oksydanid (patrz P-74.2.1.2)

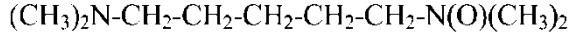
(1) *N*-oksyd *N*-chlorometanoiminy (PIN)
(3) [chloro(metylideno)azaniumylo]oksydanid (patrz także P-74.2.1.2)



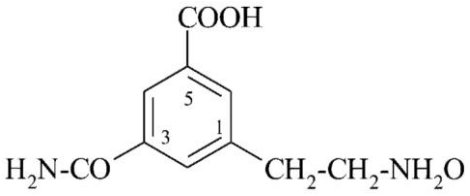
N-oksyd 1,5-bis(dimetyloamino)-*N*,*N*-dimetylopentano-3-aminy (PIN)
(nie N^3-oksyd N^1,N^1,N^3,N^3,N^5, N^5-heksametylopentano-1,3,5-triaminy; *N*-oksyd jest klasyfikowany jako zwitterjon i to jest preferowana grupa charakterystyczna)



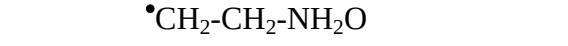
N-oksyd 3,5-bis(dimetyloamino)-*N*,*N*-dimetylopentano-1-aminy (PIN)
(nie N^1-oksyd N^1,N^1,N^3,N^3,N^5, N^5-heksametylopentano-1,3,5-triaminy; *N*-oksyd jest klasyfikowany jako zwitterjon i to jest preferowana grupa charakterystyczna)



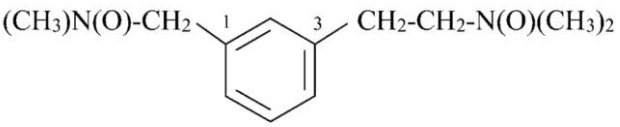
N-oksyd 5-(dimetyloamino)-*N*,*N*-dimetylopentano-1-aminy (PIN)
(nie N^1-oksyd N^1,N^1,N^5, N^5-tetrametylopentano-1,5-diaminy; *N*-oksyd jest klasyfikowany jako zwitterjon i to jest preferowana grupa charakterystyczna)



(1) *N*-oksyd 2-(3-karbamoilo-5-karboksyfenylo)etano-1-aminy (PIN)
N^5-oksyd kwasu 3-karbamoilo-5-(2-aminoetylo)benzoesowego
{nie {[2-(3-karbamoilo-5-karboksyfenylo)etylo]azaniumylo}oksydanid (patrz także P-74.2.1.2)}



(2) 2-(okso-λ^5-azanylo)etyl (PIN)
(3) 2-(oksydoazaniumylo)etyl



(2) *N*-oksyd 2-{3-[(dimetylookso-λ^5-azanylo)metylo]fenylo}-*N*,*N*-dimetyloetano-1-aminy

N^1,N^3-dioksyd 2-{3-[(dimetyloamino)metylo]fenylo}-*N*,*N*-dimetyloetano-1-aminy
(3) *N*-oksyd 2-(3-{[dimetylo(oksydo)azaniumylo]metylo}fenylo)-*N*,*N*-dimetyloetano-1-aminy (PIN; patrz także P-74.2.1.2)

$(CH_3\text{-}CH_2)_3NS$

(1) *N*-sulfid *N*,*N*-dietyloetanoaminy (PIN)
(3) (trietyloazaniumylo)sulfanid (patrz także P-74.2.1.2)

P-62.6 SOLE AMIN I IMIN

P-62.6.1 Nazwy kationów i anionów

Sole tetrawalencyjnego azotu $R_4N^+X^-$ (gdzie jedna grupa R reprezentuje macierzyste wodorki, aminy lub iminy, a inne grupy są atomami wodoru lub podstawnikami) nazywa się jedną z następujących metod:

(1) dodając przyrostek ‘ium’ do nazwy aminy lub iminy, podstawniki wymienia się jako przedrostki, nazwę anionu dodaje się jako osobny wyraz;
(2) przez podstawienie macierzystego wodorku ‘azanium’, NH_4^+;
(3) przez podstawienie macierzystego wodorku ‘amonium’, NH_4^+; tylko dla czwartorzędowych soli.

Metoda (1) prowadzi do preferowanych nazw IUPAC.

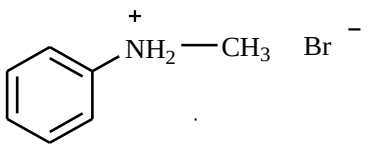
Przykłady:

$CH_3\text{-}NH_3^+\ Cl^-$
(1) chlorek metanoaminium (PIN)
(2) chlorek metyloazanium

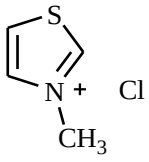
$CH_3\text{-}CH_2\text{-}NH_2^+\text{-}CH_3\ Br^-$
(1) bromek *N*-metyloetanoaminium (PIN)
(2) bromek etylo(metylo)azanium

$CH_3\text{-}CH_2\text{-}N^+H(CH_3)_2\ I^-$
(1) jodek *N*,*N*-dimetyloetanoaminium (PIN)
(2) jodek etylodimetyloazanium
(3) jodek etylodimetyloamonium

$(CH_3)_4N^+\ I^-$
(1) jodek *N*,*N*,*N*-trimetylometanoaminium (PIN)
(2) jodek tetrametyloazanium
(3) jodek tetrametyloamonium



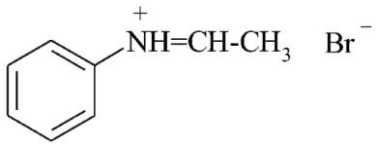
bromek *N*-metyloanilinium (PIN)
(1) bromek *N*-metylobenzenoaminium
(2) bromek metylo(fenylo)azanium



(1) chlorek 3-metylo-1,3-tiazol-3-ium (PIN)

$CH_3\text{-}CH{=}NH^+\text{-}CH_3\ Cl^-$
(1) chlorek *N*-metyloetanoiminium (PIN)

(2) chlorek etylideno(metylo)azanium

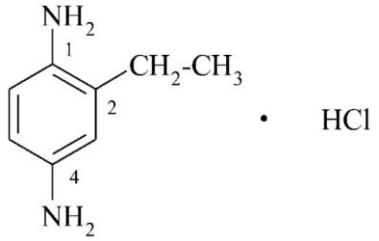


(1) bromek *N*-fenyloetanoiminium (PIN)
(2) bromek etylideno(fenylo)azanium

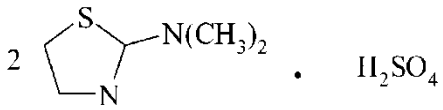
P-62.6.2 Sole niezdefiniowanych struktur (addukty)

Kiedy powyższa zasada nie może być zastosowana ponieważ struktura jest niezdefiniowana, sole amin i imin nazywa się jako addukty organiczno-nieorganiczne, patrz P-14.8.2. Wzory tych adduktów zapisuje się jak opisano w P-14.8. Nazwy konstruuje się w kolejności w jakiej formule są zapisane. Preferowane nazwy IUPAC nie mogą być przypisane solom zawierającym nieorganiczne kwasy oczekujące na rozszerzenie zasad wyboru preferowanych nazw IUPAC dla nieorganicznych substancji.

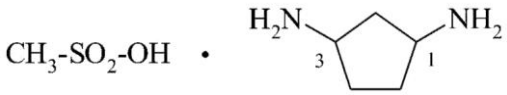
Przykłady:



chlorowodór-2-etylobenzeno—1,4-diamina (1/1)



kwas siarkowy—*N*,*N*-dimetylo-1,3-tiazolidyno-2-amina (2/1)



kwas metanosulfonowy—cyklopentano-1,3-diamina (1/1) (PIN)

P-63 ZWIĄZKI HYDROKSYLOWE, ETERY, PEROKSOLE), PEROKSYDY I ANALOGI CHALKOGENOWE

P-63.0 Wprowadzenie
P-63.1 Związki hydroksylowe i analogi chalkogenowe

P-63.2 Etery i analogi chalkogenowe
P-63.3 Peroksydy (nadtlenki) i analogi chalkogenowe
P-63.4 Peroksole (Hydroperoksydy) i chalkogenowe analogi
P-63.5 Cykliczne etery i peroksydy oraz analogi chalkogenowe
P-63.6 Sulfotlenki i sulfony
P-63.7 Związki polifunkcyjne
P-63.8 Sole związków hydroksylowych, związków hydroperoksy i ich analogów chalkogenowych

P-63.0 WPROWADZENIE

Tradycyjnie, związki hydroksylowe są związkami mającymi jedną lub więcej grup hydroksylowych przyłączonych do atomów węgla. Alkohole, fenole, 'enole' i 'ynole' uznaje się za ważne klasy związków hydroksylowych. Ta kategoria jest rozciągnięta tak, aby obejmowała związki mające jedną lub więcej grup hydroksylowych przyłączonych do atomów innych niż węgiel, bez klasyfikowania jako kwasy, jak zdefiniowano w starszeństwie klas. Na przykład, H_2SiOH jest klasyfikowany i nazywany jako związek hydroksylowy, silanol, ale $Si(OH)_4$ jest klasyfikowany i nazywany jako kwas, kwas ortokrzemowy.

Przyrostek 'peroksol' jest teraz wprowadzony jako nazwa grupy –OOH, dawniej nazywanej w nomenklaturze klas funkcyjnych 'hydroperoksydem' (hydronadtlenek). Analogi chalkogenowe nazywa się przyrostkami takimi jak 'tioperoksol', 'ditioperoksol', 'selenoperoksol' i 'selenotioperoksol'.

Reguły dla [illegible] ksydów i ich analogów chalkogenowych, dyskutowane jako reguły C-201 do C-218 w Zaleceniach z 1979 (odn. 1) i reguła R-5.5. w Przewodniku z 1993 (odn. 2), są zastąpione przez odpowiednie reguły opisane w P-63.

P-63.1 ZWIĄZKI HYDROKSYLOWE I ANALOGI CHALKOGENOWE

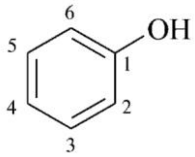
Nazwy generowane podstawnikowo są preferowanymi nazwami IUPAC zamiast nazw klas funkcyjnych lub nazw zachowanych, z wyjątkiem zachowanej nazwy 'fenol', która może być całkowicie podstawiona. Nazwy klas funkcyjnych są tradycyjnymi nazwami, które są ograniczone dziś do alkoholi, R-OH, gdzie grupa R- jest prostą grupą alifatyczną lub acykliczną.

P-63.1.1 Nazwy zachowane
P-63.1.2 Systematyczne nazwy alkoholi, fenoli, enoli i ynoli
P-63.1.3 Heterole
P-63.1.4 Nomenklatura podstawnikowa, tryb przedrostka
P-63.1.5 Siarkowe, selenowe i tellurowe analogi związków hydroksylowych
P-63.1.6 Polifunkcyjne związki hydroksylowe

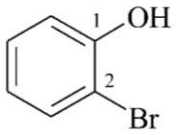
P-63.1.1 Nazwy zachowane

P-63.1.1.1 Tylko jedna nazwa jest zachowana, fenol, dla C_6H_5-OH, zarówno jako preferowana nazwa jak i dla ogólnej nomenklatury. Struktura jest podstawialna w każdej pozycji. Zalecane są lokanty 2, 3 i 4 a nie *o, m* i *p*.

Przykłady:

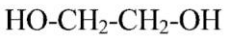


fenol (PIN; zachowana nazwa)

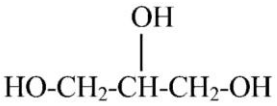


2-bromofenol (PIN)
(nie *o*-bromofenol)

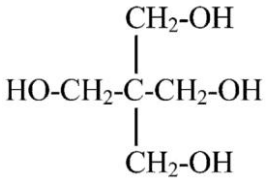
P-63.1.1.2 Następujące nazwy są zachowane, ale tylko dla nomenklatury ogólnej i tylko kiedy są niepodstawione



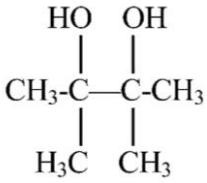
glikol etylenowy
etano-1,2-diol (PIN)



glicerol
propano-1,2,3-triol (PIN)

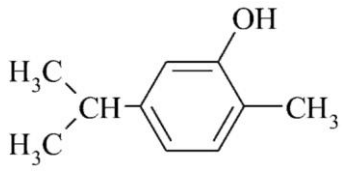


pentaerytrytol
2,2-bis(hydroksymetylo)propano-1,3-diol (PIN)

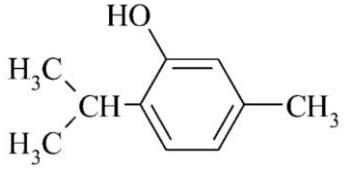


pinakol
2,3-dimetylobutano-2,3-diol (PIN)

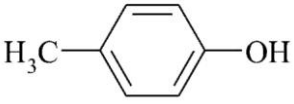
krezol (pokazany *p*-izomer ;także *o*- i *m*-izomery)
4-metylofenol (PIN)



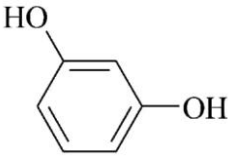
karwakrol
2-metylo-5-(propan-2-ylo)fenol (PIN)



tymol
5-metylo-2-(propan-2-ylo)fenol (PIN)

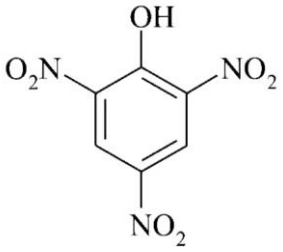


pirokatechol
benzeno-1,2-diol

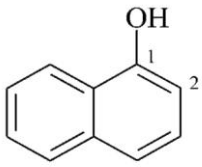


rezorcynol
benzeno-1,3-diol (PIN)

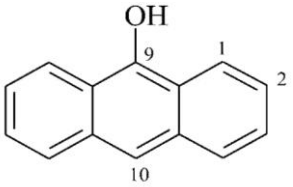
hydrochinon
benzeno-1,4-diol (PIN)



kwas pikrynowy
2,4,6-trinitrofenol (PIN)



1-naftol
naftalen-1-ol (PIN)



9-antrol
antracen-9-ol (PIN)

P-63.1.2 Systematyczne nazwy alkoholi, fenoli, enoli i enoli

Związki hydroksylowe nazywa się na trzy sposoby:

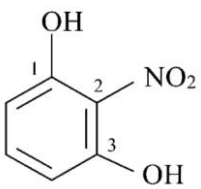
(1) podstawnikowo, używając przyrostka ‘ol’ i przedrostka ‘hydroksy’. Obecność kilku charakterystycznych grup ‘ol’ jest wskazywana liczbowym, zwielokrotniającym przedrostkiem ‘di’, ‘tri’, itd.. Reguła P-44 jest stosowana gdy musi zostać wybrany główny łańcuch lub starszy układ pierścieni. Kiedy jest możliwy wybór numeracji związku, początek i kierunek numeracji związku wybiera się tak, by przypisać najniższe lokanty przyrostkowi ‘ol’;

(2) nomenklaturą klas funkcyjnych i określeniem klasy ‘alkoholu’;

(3) jako zespoły identycznych jednostek przez nomenklaturę multiplikacyjną, kiedy warunki do jej użycia są spełnione (patrz P-51.3)

Metoda (1) generuje preferowane nazwy IUPAC. Nazwy jako zespołów identycznych jednostek, metodą (3), są preferowane dla tych, które są tworzone przez proste podstawienie (P-51.1.5).

Przykłady:



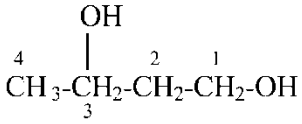
(1) 2-nitrobenzeno-1,3-diol (PIN)
(nie 2-nitrorezorcynol)

CH_3-OH

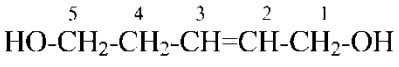
(1) metanol (PIN)
(2) alkohol metylowy

$(CH_3)_3C$-OH

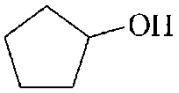
(1) 2-metylopropan-2-ol (PIN)
(2) alkohol *tert*-butylowy



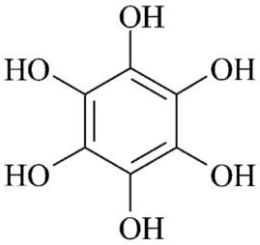
(1) butano-1,3-diol (PIN)



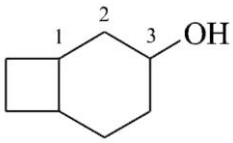
(1) pent-2-eno-1,5-diol (PIN)



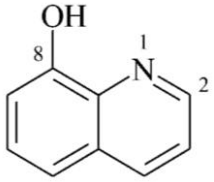
(1) cyklopentanol (PIN)



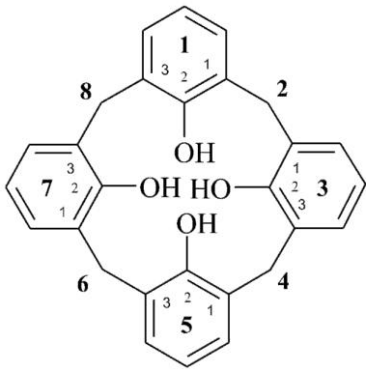
benzenoheksaol (PIN)



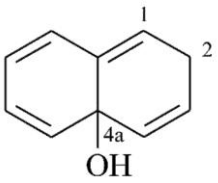
(1) bicyklo[4.2.0]oktan-3-ol (PIN)



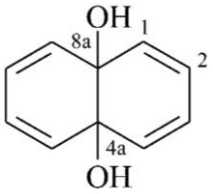
(1) chinolin-8-ol (PIN)



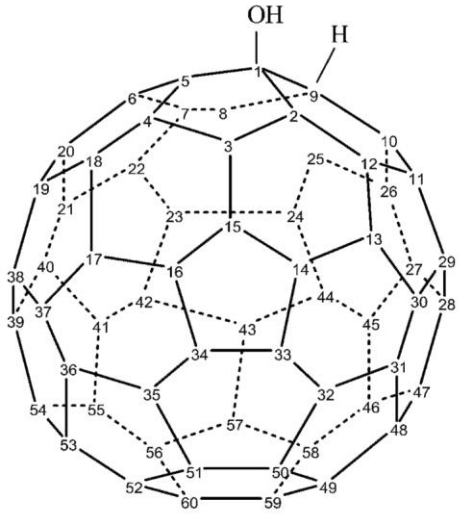
1,3,5,7(1,3)-tetrabenzenacylooktafano-1^2,3^2,5^2,7^2-tetraol (PIN)



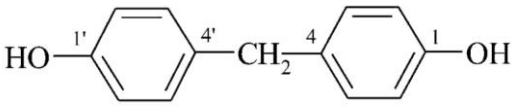
(1) naftalen-4a(*2H*)-ol (PIN)
2,4a-dihydronaftalen-4a-ol
(patrz P-58.2)



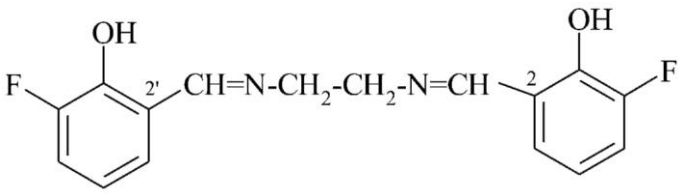
(1) naftaleno-4a,8a-diol (PIN)
4a,8a-dihydronaftaleno-4a,8a-diol
(patrz P-58.2)



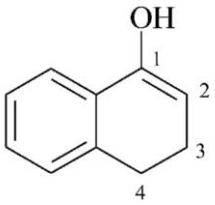
(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren-1(*9H*)-ol (PIN)
1,9-dihydro(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren-1-ol
(patrz P-8.2)



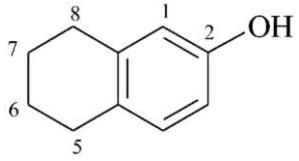
(3) 4,4′-metylenodifenol (PIN)
(1) 4-[(4-hydroksyfenylo)metylo]fenol



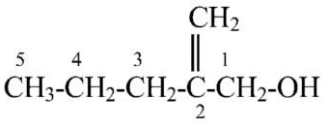
(3) 2,2′-[etano-1,2-diylobis(azanylylidenometanylideno)]bis(6-fluorofenol) (PIN)
(1) 2-fluoro-6-[(2-{[(3-fluoro-2-hydroksyfenylo)metylideno]amino}etylo)imino]metylo}fenol



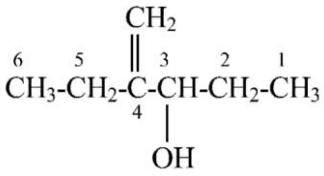
(1) 3,4-dihydronaftalen-1-ol (PIN)



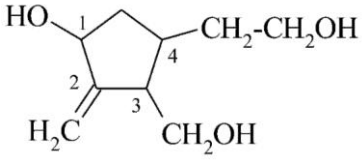
(1) 5,6,7,8-tetrahydronaftalen-2-ol (PIN)



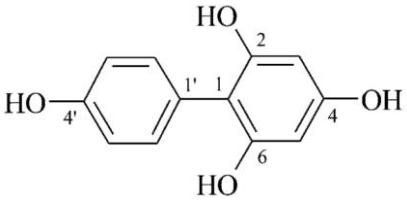
(1) 2-metylidenopentan-1-ol (PIN)



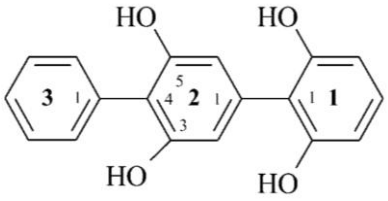
(1) 4- metylidenoheksan-3-ol (PIN)



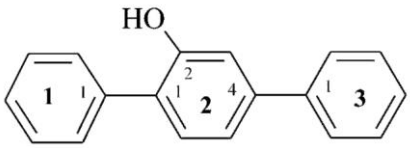
(1) 4-(2-hydroksyetylo)-3-(hydroksymetylo)-2-metylidenocyklopentan-1-ol (PIN)



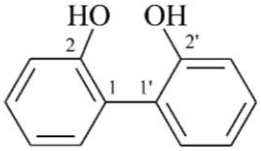
(1) [1,1′-bifenylo]2,4,4′,6-tetraol (PIN)
bifenylo-2,4,4′,6-tetraol



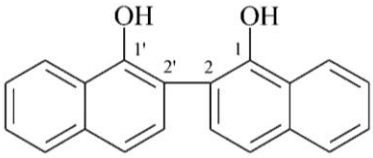
(1) [1^1,2^1:2^4,3^1-terfenylo]-1^2,1^6,2^3,2^5-tetraol (PIN)
(w nawiasach PIN załączono nazwę zespołu wymagającego lokantów, kiedy przyrostki są obecne; numerowanie patrz P-28.3.1)
[1,1′:4′,1′′-terfenylo]-2,3′,5,6 –tetraol
(patrz P-28.3.1)



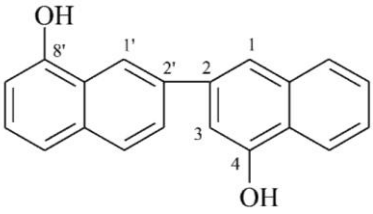
(1) [1^1,2^1:2^4,3^1-terfenyl]-2^2-ol (PIN; patrz P-28.3.1)
[1,2′:4’,1′′-terfenyl]-2′-ol (patrz P-28.3.1)



(1) [1,1′-bifenylo]-2,2′-diol (PIN)
2,2′-bifenol



(1) [2,2′-binaftaleno]-1,1′-diol (PIN)
2,2′-bi-1-naftol



[2,2′-binaftaleno]-4,8′-diol (PIN)
3,7′-bi-1-naftol

P-63.1.3 Heterole

Kiedy grupa hydroksylowa jest przyłączona do atomu innego niż węgiel, związki hydroksylowe należą do klasy związków nazywanych heterolami. Są one klasyfikowane jako związki hydroksylowe i nazywane z użyciem przyrostka ‘ol’, chyba że są sklasyfikowane jako kwasy i mają zachowaną nazwę. Nazwy tworzone przy użyciu przyrostka są preferowane względem tych tworzonych z pomocą przedrostka ‘hydroksy’.

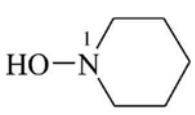
Przykłady:

$(CH_3)_3Si\text{-}OH$

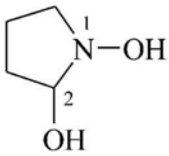
trimetylosilanol (PIN)
hydroksy(trimetylo)silan
(silan jest wstępnie wybraną nazwą; patrz P-12.2)

$(CH_3\text{-}CH_2)_2Al\text{-}OH$

dietyloalumanol
dietylo(hydroksy)aluman
(aluman jest wstępnie wybraną nazwą; patrz P-12.2)



piperydyn-1-ol (PIN)
1-hydroksypiperydyna
N-hydroksypiperydyna



pirolidyno-1,2-diol (PIN)
1-hydroksypirolidyn-2-ol
N-hydroksypirolidyn-2-ol

$P(OH)_3$

$H_2As\text{-}OH$

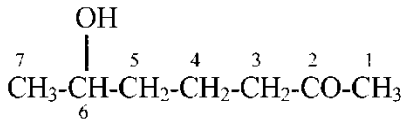
kwas fosforawy
(zachowana wstępnie wybrana nazwa)
(nie fosfanotriol)

(kwas arsynawy)
(zachowana wstępnie wybrana nazwa)
(nie arsanol)

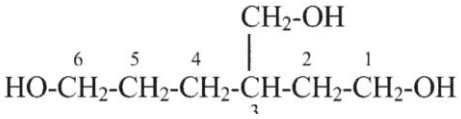
P-63.1.4 Nomenklatura podstawnikowa, tryb przedrostkowy

Grupy hydroksylowe wskazuje się przedrostkiem ‘hydroksy’ kiedy:
(1) jest obecna grupa mająca pierwszeństwo wymieniania jako główna grupa charakterystyczna; lub
(2) grupa hydroksylowa nie może być wskazana przyrostkiem.

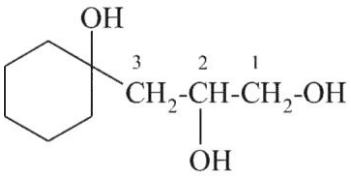
Przykłady:



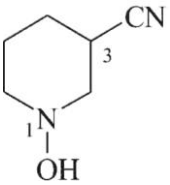
(1) 6-hydroksyheptan-2-on (PIN)



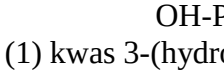
(2) 3-(hydroksymetylo)heksano-1,6-diol (PIN)



(2) 3-(1-hydroksycykloheksylo)propano-1,2-diol (PIN)



(1) 1-hydroksypiperydyno-3-karbonitryl (PIN)



(1) kwas 3-(hydroksyfosfanylo)propanowy (PIN)

P-63.1.5 Siarkowe, selenowe i tellurowe analogi hydroksy związków

Siarkowe, selenowe i tellurowe analogi związków hydroksylowych nazywa się podstawnikowo używając odpowiednio przyrostków ‘tiol’, ‘selenol’ i ‘tellurol’ i przyrostków ‘sulfanyl’, ‘selanyl’ i ‘tellanyl’; obecność kilku charakterystycznych grup ‘ol’ tego samego rodzaju wskazuje się

przedrostkami zwielokrotniającymi ‘di’, ‘tri’, itd. Przedrostki ‘merkapto’ (-SH) i ‘hydroseleno’ lub ‘selenylo’ (-SeH), itd. nie są dłużej zalecane.

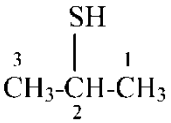
Nomenklatura grup funkcyjnych nie jest używana.

Nazwy zespołów identycznych jednostek tworzy się metodami opisanymi w P-15.3 i P-51.3. Nazwy diwalencyjnych przedrostków podaje P-63.2.5.1. Nazwy multiplikacyjne są preferowane w stosunku do nazw podstawnikowych, kiedy wszystkie warunki dla ich tworzenia są spełnione (P-51.1.5).

Szereg starszeństwa siarki selenu i telluru, analogów związków hydroksylowych:

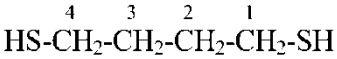
O > S > Se > Te.

Przykłady:

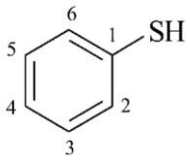


propano-2-tiol (PIN)

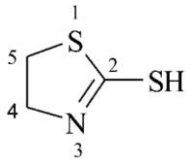
etanoselenol (PIN)



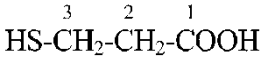
butano-1,4-ditiol (PIN)



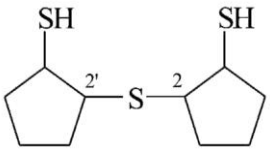
benzenotiol (PIN)
(nie tiofenol)



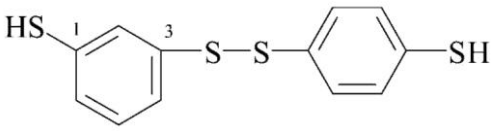
4,5-dihydro-1,3-tiazolo-2-tiol (PIN)



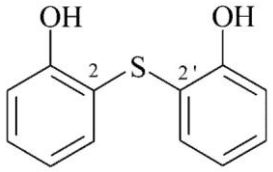
kwas 3-sulfanylopropanowy (PIN)



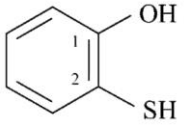
2,2′-sulfanodiylodi(cyklopentano-1-tiol) (PIN)



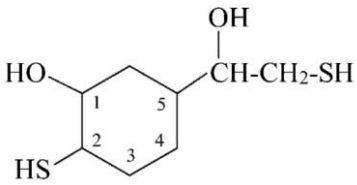
3-[(4-sulfananylofenylo)disulfanylo]benzeno-1-tiol (PIN)
3,4′′-disulfanodiylodi(benzeno-1-tiol)



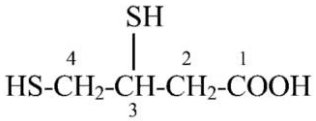
2,2′-sulfanodiyldifenol (PIN)
2-[(2-hydroksyfenylo)sulfanylo]fenol



2-sulfanylofenol (PIN)



5-(1-hydroksy-2-sulfanyloetylo)-2-sulfanylocykloheksan-1-ol (PIN)
(pierścień preferowany bardziej niż łańcuch, patrz P-52.2.9)
1-(3-hydroksy-4-sulfanylocykloheksylo)-2-sulfanyloetan-1-ol



kwas 3,4-bis(sulfanylo)butanowy (PIN)

P-63.2 ETERY I ANALOGI CHALKOGENOWE

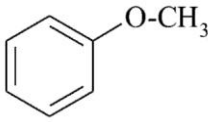
P-63.2.1 Definicje i ogólna metodologia
P-63.2.2 Nazwy grup podstawników R′-O-, R′-S-, R′-Se- i R′-Te-
P-63.2.3 Zachowane nazwy
P-63.2.4 Nazwy systematyczne eterów
P-63.2.5 Chalkogenowe analogi eterów: sulfidy, selenidy i tellurydy

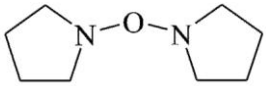
P-63.2.1 Definicje i ogólna metodologia

Etery mają ogólny wzór R-O-R′ , w którym R = R′ lub R≠R′; R i R′ mogą być jakimkolwiek podstawnikiem, alifatycznym lub cyklicznym, organylem (wolna wartościowość przyłączona do atomu węgla) lub organoheterylem (wolna wartościowość przyłączona do atomu innego niż węgiel), pochodzącym z macierzystych wodorków opisanych w P-29.

Przykłady:

CH_3-O-CH_3 $(CH_3)_3$Si-O-CH_3 H_3Ge-O-GeH_3.





Analogi chalkogenowe nazywa się ogólnie sulfidami, R-S-R′, selenidami, R-Se-R′ i tellurydami, R-Te-R′.

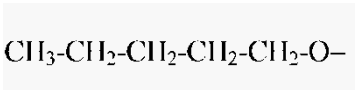
Nazwy eterów i ich analogów chalkogenowych tworzy się według różnych metod w zgodności z zasadami nomenklatury podstawnikowej, nomenklatury multiplikacyjnej, nomenklatury zamiennej (a) szkieletu, nomenklatury fanów i nomenklatury klas funkcyjnych. Niemniej jednak, niektóre etery i analogi chalkogenowe są klasyfikowane jako macierzyste wodorki i nazywane jako takie, na przykład $H_3Ge\text{-}O\text{-}GeH_3$, digermoksan i podobne związki opisane w P-21.2.3.1. W ten sposób te związków nie nazywa się za pomocą metod opisanych tutaj, ponieważ ich nazwy są przedmiotem zasad wyboru w odniesieniu do heteroatomu.

W nomenklaturze podstawnikowej, kiedy R jest różny od R′, RH jest wybierany jako macierzysty wodorek a R′-O- jest jego podstawnikiem. Nazwy tych podstawników są opisane w P-63.2.2. Nomenklatura klas funkcyjnych używa nazw podstawników dla R i R′.

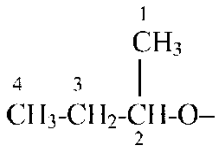
P-63.2.2 Nazwy podstawników R′-O-, R,-S-, R′-Se- i R′-Te-

P-63.2.2.1 Nazwy systematyczne

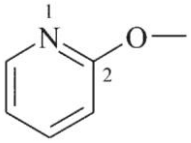
P-63.2.2.1.1 Nazwy przedrostków podstawnikowych dla grup R′-O- tworzy się przez powiązanie, to znaczy przez dodanie przedrostka ‘oksy’ do nazwy przedrostka podstawnika dla grupy R′. Te przedrostki związków wymagają liczbowych przedrostków zwielokrotniających ‘bis’, ‘tris’, itd.
Przykłady:



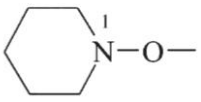
pentyloksy (preferowany przedrostek)



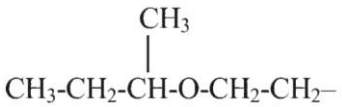
butan-2-yloksy (preferowany przedrostek)
1-metylopropoksy



pirydyn-2-yloksy
(preferowany przedrostek)
2-pirydyloksy



piperydyn-1-yloksy
(preferowany przedrostek)
(nie piperydynooksy)



2-(butan-2-yloksy)etyl (preferowany przedrostek))

$H_3Si\text{-}O\text{-}$

sililoksy (wstępnie wybrana nazwa)
(nie siloksy)

P-63.2.2.1.2 Przedrostki podstawnikowe dla podstawników R′S-, R′Se-, i R′Te- tworzone przez podstawienie grup HS-, ‘sulfanyl’, HSe-, ‘selenyl’ i HTe-, ‘tellanyl’; wymagają zwielokrotniających przedrostków ‘bis’, ’tris’, itd. Dawne nazwy ‘tio’, -S-; ‘seleno’, -Se-; i’telluro’, -Te- mogą być używane jako przedrostki addytywne w nomenklaturze ogólnej.

Przykłady:

CH_3-S-
metylosulfanyl (preferowany przedrostek)
metylotio

C_6H_5-Se-
fenyloselanyl (preferowany przedrostek)
fenyloseleno

P-63.2.2.1.3 Grupy diwalencyjne, takie jak –O-Y-O- lub –S-Y-S- nazywa się przez dodanie (powiązanie) przedrostków ‘oksy’, ‘sulfanodiyl’, itd. do nazwy diwalencyjnej grupy Y. Zwielokrotniający przedrostek ‘bis’ jest używany w preferowanych nazwach zamiast ‘di’, żeby uniknąć dwuznaczności. Po zwielokrotniającym przedrostku ‘bis’, ‘tris’ itd., nawet po prostych przedrostkach, stosuje się nawiasy.

Przykłady:

-O-CH_2-O-
metylenobis(oksy)
(preferowany przedrostek)
(nie metylenodioksy)

-S-CH_2-S-
metylenobis(sulfanodiyl)
(preferowany przedrostek)
metylenobis(tio)

-CH_2-S-CH_2-
sulfanodiylobis(metyleno) (preferowany przedrostek)
(nie sulfanodiylodimetyleno)

P-63.2.2.2 Zachowane nazwy

Dla podstawników R-O- zachowane są niektóre skrócone nazwy. Są używane zarówno jako preferowane przedrostki IUPAC i w nomenklaturze ogólnej; są całkowicie podstawialne (z wyjątkiem *tert*-butoksy) i są rozważane jako proste przedrostki wymagające liczbowych przedrostków ‘di’, ‘tri’, itd.

Przykłady:

CH_3-O-
metoksy
(preferowany przedrostek)

CH_3-CH_2-O-
etoksy
(preferowany przedrostek)

CH_3-$[CH_2]_2$-O-
propoksy
(preferowany przedrostek)

CH_3-$[CH_2]_3$-O-
butoksy
(preferowany przedrostek)

C_6H_5-O-
fenoksy
(preferowany przedrostek)

$(CH_3)_3$-C-O-
tert-butoksy
(preferowany przedrostek)

Następujący przedrostek jest zachowany w użyciu tylko w ogólnej nomenklaturze; niedozwolone jest podstawienie:

	izopropoksy
$(CH_3)_2$-CH-O-	1-metyloetyloksy
	propan-2-yloksy (preferowany przedrostek)

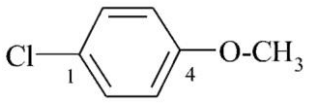
Przedrostki '*sec*-butoksy' i 'izobutoksy' nie są już dłużej zalecane:

CH_3-CH_2-CH(CH_3)-O-	$(CH_3)_2$CH-CH_2-O-
butan-2-yloksy (preferowany przedrostek)	2-metylopropoksy (preferowany przedrostek)
1-metylopropoksy	(nie izobutoksy)
(nie *sec*-butoksy)	

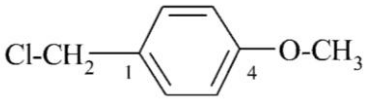
P-63.2.3. Zachowane nazwy eterów

Anizol, C_6H_5-O-CH_3, jest jedyną nazwą w klasie eterów, która jest zachowana zarówno jako preferowana nazwa IUPAC jak i w nomenklaturze ogólnej. W preferowanych nazwach IUPAC niedozwolone jest podstawienie; w ogólnej nomenklaturze podstawienie jest dozwolone zarówno w pierścieniu jak i w łańcuchu bocznym, pod pewnymi warunkami (patrz P-34.1.1.4).

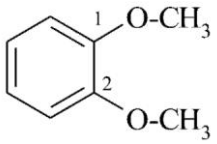
Przykłady:



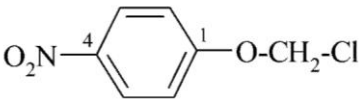
1-chloro-4-metoksybenzen (PIN)
(bez podstawienia anizolu dla PIN)
4-chloroanizol



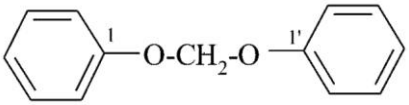
1-(chlorometylo)-4-metoksybenzen (PIN;
bez podstawienia anizolu dla PIN)
4-(chlorometylo)anizol
chlorek 4-metoksybenzylu (zasady
podstawienia benzylu patrz P-29.6.2.1)



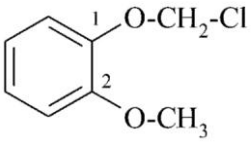
1,2-dimetoksybenzen (PIN;
bez podstawienia anizolu dla PIN)
(nie 2-metoksyanizol; patrz
P-34.1.1.4 i P-15.1.8.2 zasady
podstawienia anizolu)

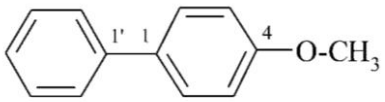


1-(chlorometoksy)-4-nitrobenzen (PIN;
bez podstawienia anizolu dla PIN)
α-chloro-4-nitroanizol (patrz P-34.1.1.4
i P-15.1.8.2. zasady podstawienia
anizolu)



1,1′-[metylenobis(oksy)]dibenzen (PIN)
α-fenoksyanizol





1-(chlorometoksy)-2-metoksybenzen (PIN;
bez podstawienia anizolu dla PIN)
α-chloro-2-metoksyanizol
[nie 2-(chlorometoksy)anizol]

4-metoksy-1,1′-bifenyl (PIN)
(nie 4-fenyloanizol; bez podstawienia anizolu dla PIN)
(nie 1-metoksy-4-fenylobenzen; układ pierścieni bifenylu jest starszy od pojedynczego pierścienia benzenu)

P-63.2.4 Systematyczne nazwy eterów

Etery mające ogólną strukturę R-O-R (R=R′ lub R≠R′) noszą nazwę klasy ‘eter’ i nazywa się je jedną z pięciu następujących metod:

(1) podstawnikowo, nazwa grupy R′-O- jest podstawnikiem nazwy macierzystego wodorku RH;
(2) nomenklaturą klas funkcyjnych, używając określenia ‘eter’ i kiedy grupy są różne, wymieniając dwie grupy podstawników w alfanumerycznym porządku;

(3 nomenklaturą multiplikacyjną, kiedy R i R′ są składnikami cyklicznymi;

(4) nomenklaturą zamienną ‘a’szkieletu;

(5) nomenklaturą fanów.

Nazwy klas funkcyjnych bazujące na nazwie klasy ‘oksyd’(‘tlenek’) nie są zalecane.

P-63.2.4.1 Nazwy eterów, kiedy R i R′ są obie grupami alifatycznymi lub kiedy jedna jest cykliczna, tworzy się metodami (1), (2) i (4). Metody (1) lub (4) prowadzą do preferowanych nazw IUPAC.

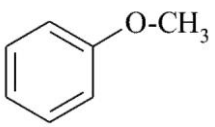
Przykłady:

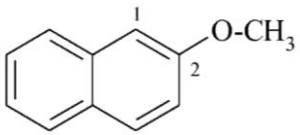
CH_3-O-CH_3

(1) metoksymetan (PIN)
(2) eter dimetylowy

CH_3-CH_2-O-CH_3

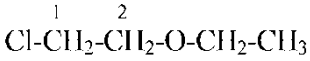
(1) metoksyetan (PIN)
(2) eter etylowo-metylowy



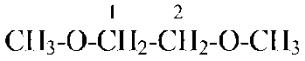


(1) anizol (PIN; zachowana nazwa)
metoksybenzen
(2) eter fenylowo-metylowy

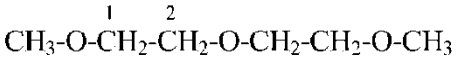
(1) 2-metoksynaftalen (PIN)
(2) eter metylowo- naftalen-2-ylowy
eter metylowo- 2-naftylowy



(1) 1-chloro-2-etoksyetan (PIN)
(2) eter 2-chloroetylowo-etylowy
(nie oksyd 2-chloroetylowo-etylowy)

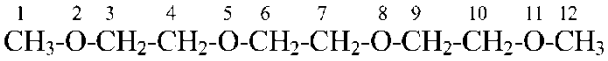


(1) 1,2-dimetoksyetan (PIN)
(2) eter dimetylowo-etano-1,2-diylowy



(1) 1-metoksy-2-(2-metoksyetoksy)etan (PIN)

Nomenklatura zamienna ‘a’ szkieletu [metoda (4)] generuje preferowane nazwy IUPAC, kiedy warunki do użycia tego typu nomenklatury są spełnione (patrz P-15.4); jeśli nie, musi być użyta nomenklatura podstawnikowa.

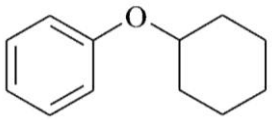


(4) 2,5,8,11-tetraoksadodekan (PIN)
(1) 1-metoksy-2-[2-(2-metoksyetoksy)etoksy]etan

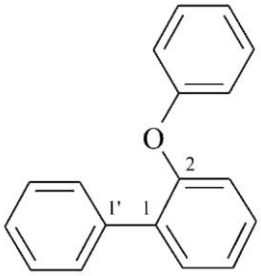
P-63.2.4.2 Nazwy eterów, w których obie grupy R i R′ są cykliczne, tworzy się metodami (1), (2), (3) lub (5). Metody (1), (3) lub (5) prowadzą do preferowanych nazw IUPAC.

Kiedy używana jest metoda (1), to jest nomenklatura podstawnikowa, jako macierzysty wodorek muszą być wybrane (patrz P-44), starszy pierścień lub grupa pierścieni.

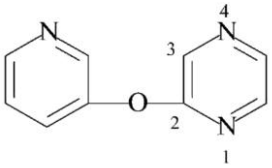
Przykłady:



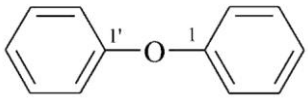
(1) (cykloheksylo)benzen (PIN)
(2) eter cykloheksylowo-fenylowy



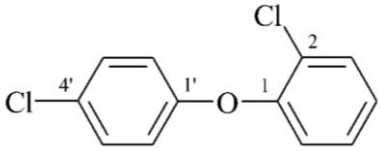
(1) 2-fenoksy-1,1′-bifenyl (PIN)
(2) eter bifenyl-2-ylowo-fenylowy



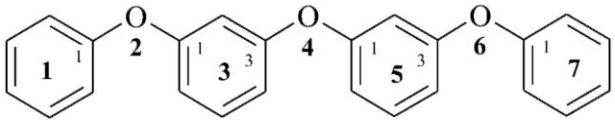
(1) 2-[(pirydyn-3-yl)oksy]pirazyna (PIN)
(2) eter pirazyn-2-ylowo- 3-pirydylowy



(3) 1,1′-oksydibenzen (PIN)
(1) fenoksybenzen
(2) eter difenylowy



(1) 1-chloro-2-(4-chlorofenoksy)benzen (PIN)
(3) 2,4′-dichloro-1,1′-oksydibenzen (pokazano numerację)
(2) eter 2-chlorofenylowo-4-chlorofenylowy



(5) 2,4,6-trioksa-1,7(1),3,5(1,3)-tetrabenzenaheptafan (PIN)
(3) 1,1′-oksybis(3-fenoksybenzen)

P-63.2.5 Nazwy analogów chalkogenowych eterów, tzn. sulfidów, selenidów i tellurydów

P-63.2.5.1 Ogólna metodologia

Sulfidy R-S-R′, selenidy R-Se-R′ i tellurydy R—Te-R′ nazywa się następującymi metodami:

(1) poprzedzając nazwy wodorków macierzystych, RH, nazwami podstawników R′-S-, R′-Se- lub R′-Te-, tzn. odpowiednio R′-sulfanylo, R′-selanylo i R′-tellanylo,; przedrostki ‘R′-tio’, ‘R′-seleno’ i ‘R′-telluro’ mogą być używane w ogólnej nomenklaturze. Przedrostki R′-sulfanyl, R′-selanyl i R′-tellanyl są obowiązującymi przedrostkami i mogą być przyłączone do dowolnego atomu dowolnego macierzytego wodorku;

(2) nomenklaturą klas funkcyjnych, używając określenia sulfid, selenid i telluryd dla odpowiednio –S-, -Se- i –Te-;

(3) nomenklaturą multiplikacyjną w przypadku cyklicznych wodorków macierzystych, używając przedrostków odpowiednio sulfanodiyl, -S- (nie tio); selanodiyl –Se- (nie seleno); i tellanodiyl (nie telluro);

(4) nomenklaturą zamienną ‘a’szkieletu;

(5) nomenklaturą fanów

Nazwy tworzone przez podstawienie macierzystych wodorków oksydanu, sulfanu, selanu i tellanu, H_2O, H_2S, H_2Se i H_2Te, odpowiednio, stosownymi podstawnikami nie są zalecane.

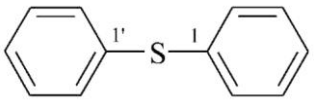
Nazwy tworzone przez nomenklaturę zamienną funkcji z zachowanej nazwy anizolu nie są dłużej zalecane. Nazwy klas, takie jak tiooksyd nie są zalecane.

Metoda (1), nomenklatura podstawnikowa, daje preferowane nazwy IUPAC; metody (3), (4) lub (5) generują preferowane nazwy IUPAC, kiedy warunki do ich użycia są zadowalające.

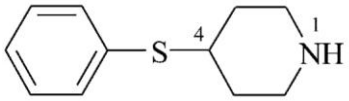
Przykłady:

CH_3-S-CH_3

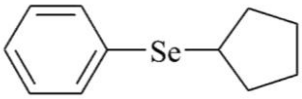
(1) (metylosulfanylo)metan (PIN)
(metylotio)metan
(2) sulfid dimetylowy



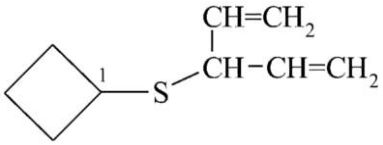
(3) 1,1′-sulfanodiylodibenzen (PIN)
(nie 1,1′-tiodibenzen)
(1) (fenylosulfanylo)benzen
(fenylotio)benzen
(2) sulfid difenylowy



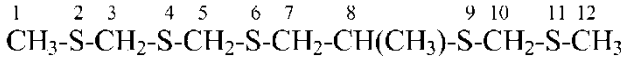
(1) 4-(fenylosulfanylo)piperydyna (PIN)
4-(fenylotio)piperydyna
(2) sulfid fenylowo-piperydyn-2-ylowy



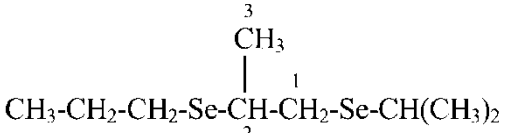
(1) (cyklopentyloselanylo)benzen (PIN)
(cyklopentyloseleno)benzen
(2) selenid cyklopentylowo-fenylowy



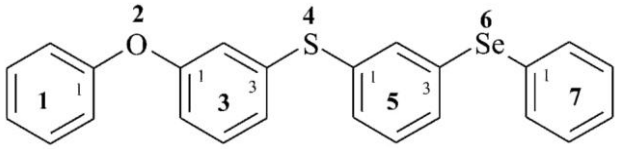
(1) 1-[(penta-1,4-dien-3-ylo)sulfanylo]cyklobutan (PIN)
1-[(penta-1,4-dien-3-ylo)tio]cyklobutan
(pierścień preferowany przed łańcuchem, patrz P-52.2.9)
(2) sulfid cyklobutylowo-penta-1,4-dien-3-ylowy
sulfid cyklobutylowo-1-etenyloprop-2-en-1-ylowy



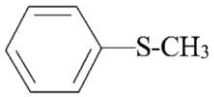
(4) 8-metylo-2,4,6,9,11-pentatiadodekan (PIN; nazwa zamienna szkieletu)
(1) 2-{[(metylosulfanylo)metylo]sulfanylo}-1-[({[(metylosulfanylo)metylo]
sulfanylo}metylo)sulfanylo]propan
2-{[(metylotio)metylo]tio}-1-[({[(metylotio)metylo]tio}metylo)tio]propan
(nazwa podstawnikowa)



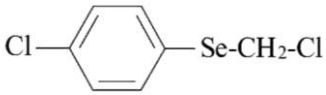
(1) 1-[(propan-2-ylo)selanylo]-2-(propyloselanylo)propan (PIN)
1-[(propan-2-ylo)seleno)]-2-(propyloseleno)propan
(nie 2,5-dimetylo-3,6-diselenanonan; nomenklatura zamienna ‘a’ szkieletu wymaga czterech heterojednostek, patrz P-51.4)



(5) 2-oksa-4-tia-6-selena-1,7(1),3,5(1,3)-tetrabenzenaheptafan (PIN, nazwa fanowa)
1-fenoksy-3{[3-(fenyloselanylo)fenylo]sulfanylo}benzen (nazwa podstawnikowa)
3-[3-(fenoksyfenylo)sulfanylo]-1-(fenyloselanylo)benzen (nazwa podstawnikowa)
(pierwsza nazwa podstawnikowa może być preferowana, ponieważ fenoksyfenylosulfanyl jest alfabetycznie niżej od fenoksyfenylosulfanylu)



(1) (metylosulfanylo)benzen (PIN)
(nie tioanizol)



(1) 1-chloro-4-[(chlorometylo)selanylo]benzen (PIN)
(nie α,4-dichloroselenoanizol)

P-63.3 PEROKSYDY I ANALOGI CHALKOGENOWE

P-63.3.1 Peroksydy, disulfidy, diselenidy i ditellurydy

Związki o ogólnej strukturze R-OO-R′, R-SS-R′, R-SeSe-R′ i R-TeTe-R′ nazywa się następująco:

(1) podstawnikowo, addytywne połączenie nazwy przedrostka dla R′ z ‘peroksy’ daje przedrostek ‘R′-peroksy’ (nie R′, ‘R′-disulfanyl’, R′-diselanyl’ lub R′-ditellanyl’) dołączany do nazwy macierzystego wodorku, odpowiadającego grupie R);

(2) nomenklaturą klas funkcyjnych, wymieniając nazwy grup R i R′, w alfanumerycznym porządku, jeśli obecne są dwie różne grupy, i nazwa klasy peroksyd, disulfid, diselenid lub ditelluryd, odpowiednio, jako oddzielne słowo (nazwy klas, takich jak ditioperoksyd nie są zalecane);

(3) nomenklaturą multiplikacyjną, używając preferowanych przedrostków disulfanodiyl, -SS-, diselanodiyl, -SeSe-, i ditellanodiyl, -TeTe-, odpowiednio; w ogólnej nomenklaturze mogą być użyte ditio, diseleno i ditelluro.

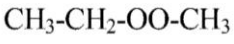
(4) nomenklaturą zamienną szkieletu

(5) nomenklaturą fanów.

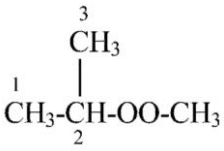
Nie zaleca się nazw utworzonych w wyniku podstawienia macierzystego wodorku dioksydanu, disulfanu, diselanu, i ditellanu HOOH, HSSH, HSeSeH, HTeTeH, odpowiednio, stosownymi podstawnikami.

Metoda (1), nomenklatura podstawnikowa, daje preferowane nazwy IUPAC; metody (3), (4) i (5) generują preferowane nazwy IUPAC, kiedy warunki do ich użycia są spełnione.

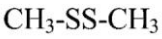
Przykłady:



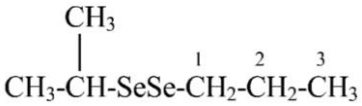
(1) (metyloperoksy)etan (PIN)
(2) peroksyd etylowo-metylowy



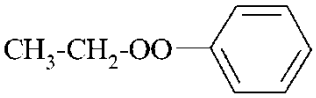
(1) 2-(metyloperoksy)propan (PIN)
(2) peroksyd izopropylowo-metylowy
peroksyd metylowo-1-metyloetylowy



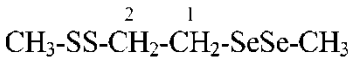
(1) (metylodisulfanylo)metan (PIN)
(2) disulfid dimetylowy



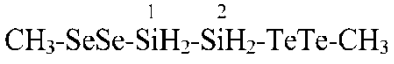
(1) 1-(propano-2-ylodiselanylo)propan (PIN)
(2) diselenid izopropylowo- propylowy
diselenid 1-metyloetylowo-propylowy



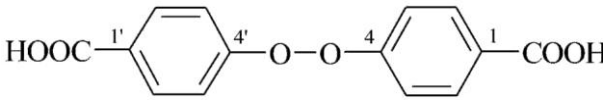
(1) (etyloperoksy)benzen (PIN)
(2) peroksyd etylowo-fenylowy



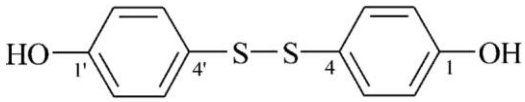
(1) 1-(metylodiselanylo)-2-(metylodisulfanylo)etan (PIN)
1-(metylodiseleno)-2-(metyloditio)etan



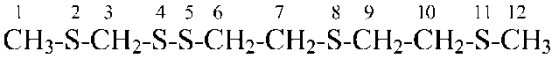
(1) 1-(metylodiselanylo)-2-(metyloditellanylo)disilane (PIN)
(disilan jest wstępnie wybraną nazwą, patrz P-12.2)
1-(metylodiseleno)-2-(metyloditio)di silan



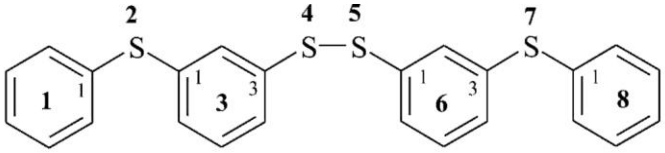
(3) kwas 4,4′-peroksydibenzoesowy (PIN)
kwas [4-(4-karboksyfenylo)peroksy]benzoesowy



(3) 4,4′-disulfanodiylodifenol (PIN)
4,4′-ditiodifenol



(4) 2,4,5,8,11-pentatiadodekan (PIN)
(1) 1-(2-{[2-(metylosulfanylo)etylo]sulfanylo}etylo)-1-[(metylosulfanylo)-metylo]disulfan



(5) 2,4,5,7-tetratia-1,8(1),3,6(1,3)-tetrabenzenaoktafan (PIN)
(1) bis[3-(fenylosulfano)fenylo]disulfan

P-63.3.2 Mieszane analogi chalkogenowe peroksydów

Mieszane chalkogenowe struktury jak R-XY-R′ lub R-YX-R′, w których X i Y są atomami O, S, Se lub Te nazywa się trzema metodami:

(1) poprzedzając nazwami podstawników R′-O-, R′-S-, R′-Se- lub R′-Te- to jest, odpowiednio, R′-oksy, R′-sulfanylo, R′-selanylo i R′-tellanyl, terminów ‘oksy’, ‘sulfanyl’, ‘selanyl’, ‘tellanyl’ a następnie dodanie takiego przedrostka do nazwy odpowiedniego wodorku macierzystego. Przedrostki R′-sulfanyl, R′-selanyl, R′-tellanyl są obowiązującymi przedrostkami i mogą być dołączone do dowolnego atomu dowolnego wodorku macierzystego; nomenklatura multplikacyjna jest używana, jeśli warunki do jej użycia są spełnione.

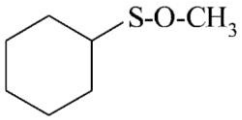
(2) wymieniając nazwy przedrostków R i R′, w alfanumerycznym szeregu, po odpowiedniej nazwie klasy ‘tioperoksyd’, ‘diselenoperoksyd’, ‘selenotioperoksyd’, itd. Każdy przedrostek R i R′ jest poprzedzony lokantem pisanym odpowiednio dużą literą, kursywą;

(3) nomenklaturą zamienną (a) szkieletu lub nomenklaturą fanów, kiedy warunki do ich użycia są spełnione;

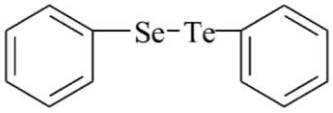
Metody (1), (2) i (3) prowadzą do nazw preferowanych przez IUPAC.

Przykłady:

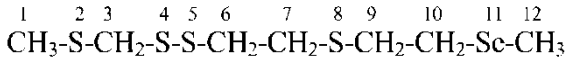
CH_3-CH_2-OS-CH_3
(1) [(metylosulfanylo)oksy]etan (PIN)
(2) tioperoksyd *O*-etylowo-*S*-metylowy
(nie metanosulfenian etylu)



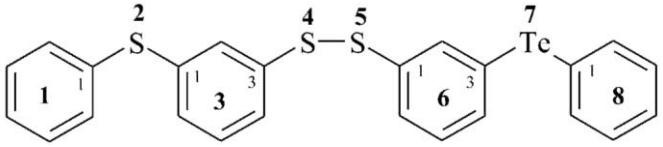
(1) (metoksysulfanylo)cykloheksan (PIN)
(2) tioperoksyd *S*-cykloheksylowo-*O*-metylowy
(nie cykloheksanosulfenian metylu)



(1) [(fenyloselanylo)tellanylo]benzen (PIN)
{nie [(fenylotellanylo)selanylo]benzen; }
fenyloselan…jest niżej alfabetycznie niż fenylotellan…(patrz P-14.5)}
(2) selenotelluroperoksyd difenylowy
(nie telluroselenoperoksyd difenylowy;
nie benzenotelluroselenian fenylu)



(3) 2,4,5,8-tetratia-11-selenadodekan (PIN)
(1) [2-({[2-metyloselenylo]etylo}sulfanylo)etylo][(metylosulfanylo)metylo]disulfan
[nie 2-{[2-(metylosulfanylo)etylo]sulfanylo}etylosulfenotionian (metylosulfanylo)metylu]



(2) 2,4,5-tritia-7-tellura-1,8(1),3,6(1,3)-tetrabenzenaoktafan (PIN)
(1)[3-(fenylotelluranylo)fenylo][3-(fenylosulfanylo)fenylo]disulfan
(nie 3-(fenylotelluranylo)benzenosulfenotionian) 3-(fenylosulfanylo)fenylu

P-63.4 HYDROPEROKSYDY (PEROKSOLE) I CHALKOGENOWE ANALOGI

P-63.4.1 Hydroperoksydy

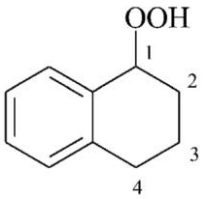
Przyrostek ‘peroksol’ obecnie jest wprowadzony jako nazwa grupy –OOH, dawniej nazywanej w nomenklaturze klas funkcyjnych ‘hydroperoksydem’ (‘hydronadtlenkiem’). Chalkogenowe analogi wskazuje się przyrostkami takimi jak ‘tioperoksol’, ‘ditioperoksol’, ‘selenoperoksol’ i ’selenotioperoksol’.

Związki o ogólnej strukturze R-OOH nazywa się ogólnie ‘hydroperoksydami’. Nazwa klasy ‘peroksol’ może być bardziej stosowna. Związki te, kiedy grupa –OOH jest główną grupą charakterystyczną, nazywa się dwojako.

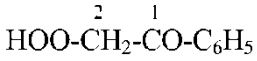
(1) podstawnikowo, używając przyrostka ‘peroksol’;

(2) nomenklaturą klas funkcyjnych, używając nazwę klasy ‘hydroperoksyd’.

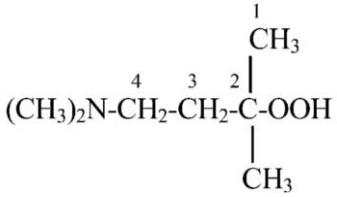
Przedrostek ‘peroksy’, nie ‘dioksy’ jest zachowany dla grupy –OO- (patrz P-63.3.1). Przedrostek ‘hydroperoksy’, jest tworzony przez powiązanie do opisu grupy –OOH jako podstawnika w obecności grupy charakterystycznej mającej pierwszeństwo w wymienianiu jako przyrostek. Metoda (1) prowadzi do preferowanych nazw IUPAC.



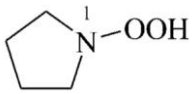
(1) 1,2,3,4-tetrahydronaftaleno-1-peroksol (PIN)
(2) hydroperoksyd 1,2,3,4-tetrahydronaftalen-1-ylu



2-hydroperoksy-1-fenyloetan-1-on (PIN)



(1) 4-(dimetyloamino)-2-metylobutano-2-peroksol
(2) hydroperoksyd 4-(dimetyloamino)-2-metylobutan-2-ylu
hydroperoksyd 3-(dimetyloamino)-1,1-dimetylopropylu



(1) pirolidyno-1-peroksol
(2) hydroperoksyd pirolid-1-ylu

P-63.4.2 Chalkogenowe analogi hydroperoksydów

P-63.4.2.1 Związki mające ogólną strukturę R-SOH lub R-OSH nazywa się ogólnie ‘tioperoksydami’ lub ‘tiohydroperoksydami’. Podobnie związki R-SeOH lub R-OSeH i R-TeOH lub

R-OTeH nazywa się, odpowiednio ‘selenoperoksydami’ lub ‘selenohydroperoksydami’ i ‘telluroperoksydami’ lub ‘tellurohydroperoksydami’. Kiedy reprezentują główną funkcję nazywa się je dwiema metodami:

(1) nomenklaturą podstawnikową i stosują przyrostki z Tabeli 6.1 tworzone w wyniku zamiany (‘a’) funkcji, wskazujące główną funkcję;

(2) nomenklaturą klas funkcyjnych, używając nazwy klasy ‘tiohydroperoksyd’, ‘selenohydroperoksyd’ lub ‘tellurohydroperoksyd’. Kiedy jest to wymagane, przedrostek ‘tio’, ‘seleno’ i ‘telluro’ umieszcza się w alfabetycznym porządku, na przykład, ‘selenotiohydroperoksyd’, itd., a lokanty *O, S, Se* lub *Te* wskazują wiązania grupy R-; kiedy obecne są dwa atomy tego samego pierwiastka, stosuje się nazwy klasy ‘disulfid’, ‘diselenid’ lub ‘ditelluryd’.

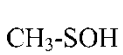
> Związki typu R-SOH, R-SeOH i R-TeOH i ich chalkogenowe analogi były poprzednio nazywane kwasami sulfenowymi, selenenowymi i tellurenowymi używając, odpowiednio przyrostka ‘kwas sulfenowy’, ‘kwas selenenowy’ i ‘kwas tellurenowy’.

Metoda (1) generuje preferowane nazwy IUPAC.

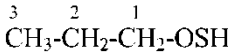
Tabela 6.1 Przyrostki wskazujące peroksole (wodoronadtlenki) modyfikowane nomenklaturą zamienną funkcji (w malejącym porządku starszeństwa jako grupa główna)

-S-OH	-*SO*-tioperoksol	-Se-SH	-*SeS*-selenotioperoksol
-Se-OH	-*SeO*-selenoperoksol	-Te-SH	-*TeS*-tellurotioperoksol
-Te-OH	-*TeO*-telluroperoksol	-S-SeH	-*SeS*-selenotioperoksol
-O-SH	-*OS*-tioperoksol	-S-TeH	-*STe*-tellurotioperoksol
-O-SeH	-*OSe*-selenoperoksol	-Se-SeH	-diselenoperoksol
-O-TeH	-*OTe*-telluroperoksol	-Te-SeH	-*TeSe*-telluroselenoperoksol
-S-SH	-ditioperoksol	-Se-TeH	-*SeTe*-selenotelluroperoksol
		-Te-TeH	-ditelluroperoksol

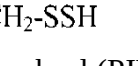
Przykłady:



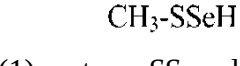
(1) metano-*SO*-tioperoksol (PIN)
(2) tiohydroperoksyd *S*-metylowy
(nie kwas metanosulfenowy)



(1) propano-1-*OS*-tioperoksol (PIN)
(2) tiohydroperoksyd *O*-propylowy



(1) etanoditioperoksol (PIN)
(2) hydrodisulfid etylowy



(1) metano-*SSe*-selenotioperoksol (PIN)
(2) selenotiohydronadtlenek *S*-metylowy

ditiohydroperoksyd etylowy

P-63.4.2.2 Przedrostki odpowiadające przyrostkom opisanym w P-63.4.2.1 tworzy się na dwa sposoby:

(1) użycie przedrostków takich jak ‘hydroperoksy’ -OOH; ‘disulfanylo’, -SSH, lub przez kombinacje przedrostków, ‘hydroksy’, -OH; ‘oksy-’ –O-; ‘sulfanylo’, -SH; itd.;

(2) użycie przedrostków, takich jak ditiohydroperoksy, -SSH; *SO*-tiohydroperoksy, -OSH; SeS-selenotiohydroperoksy, -SSeH; itd.

Metoda (1) prowadzi do preferowanych nazw IUPAC.

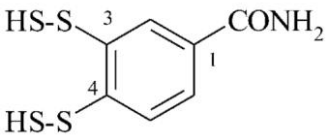
Przykłady:

$HOO\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}OH$

2-hydroperoksyetan-1-ol (PIN)

$HSS\text{-}CH_2\text{-}COOH$

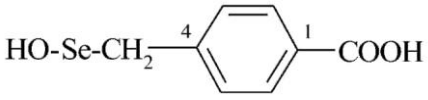
(1) kwas disulfanylooctowy (PIN)
(2) kwas (ditiohydroperoksy)octowy



(1) 3,4-bis(disulfanylo)benzamid (PIN)
(2) 3,4-bis(ditiohydroperoksy)benzamid

$HS\text{-}O\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}CN$

(1) 3-(sulfanyloksy)propanonitryl
(2) 3-(*SO*-tiohydroperoksy)propanonitryl



(1) kwas 4-[(hydroksyselanylo)metylo]benzoesowy (PIN)
(2) kwas 4-[(*OSe*-selenohydroperoksy)metylo]benzoesowy

P-63.5 CYKLICZNE ETERY, SULFIDY, SELENIDY, I TELLURYDY

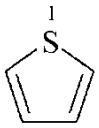
Cykliczne etery, sulfidy, selenidy i tellurydy sa heterocyklami nazywanymi następującymi metodami:

(1) używanie preferowanych zachowanych nazw opisanych w P-22.2.1 (wybranych najpierw);
(2) dla monocykli, rozszerzony system Hantzscha-Widmana (patrz P-22.2.2) lub nomenklatura zamienna ‘a’ szkieletu, dla cykli mających więcej niż 10 członów (patrz P-22.2.3);

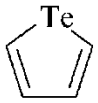
(3) nomenklatura mostkowa skondensowana
(4) użycie rozłącznych przedrostków ‘epoksy’, ‘epitio’, ‘episeleno’ lub ‘epitelluro’ w nomenklaturze podstawnikowej; są one używane głównie w nomenklaturze produktów naturalnych (patrz P-101.5.2); jakkolwiek mogą być także używane w ogólnej nomenklaturze;
(5) użycie nazw addytywnych tworzonych przez dodanie określenia ‘oksyd’, ‘sulfid’, ‘selenid’ lub ‘telluryd’ do nazwy nienasyconego związku.

Nazwy związków heterocyklicznych są preferowanymi nazwami IUPAC.

Przykłady:

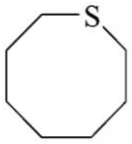


(1) tiofen (PIN)

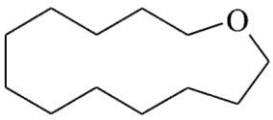


(1) tellurofen (PIN)

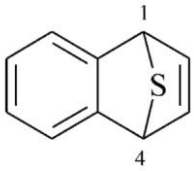
(2) oksolan (PIN)
(1) tetrahydrofuran



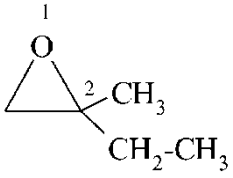
(2) tiokan (PIN)



(2) oksacyklotridekan (PIN)

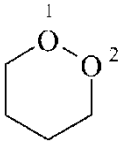


(3) 1,4-dihydro-1,4-sulfanonaftalen (PIN)

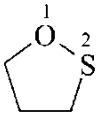


(2) 2-etylo-2-metylooksiran (PIN)
(4) 1,2-epoksy-2-metylobutan

(2) oksiran (PIN)
(5) tlenek etenu



(2) 1,2-dioksan (PIN)



(2) 1,2-oksatiolan (PIN)

P-63.6 SULFOKSYDY (SULFOTLENKI) I SULFONY

Związki o ogólnej strukturze R-SO-R′ i R-SO_2-R′ nazywane są ogólnie, odpowiednio ‘sulfoksydami’ i ‘sulfonami’, gdzie R i R′ są grupami hydrokarbylowymi. Nazywa się je na trzy następujące sposoby:

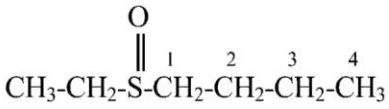
(1) podstawnikowo, dodając przedrostek grupy acylowej R′-SO- lub R′-SO_2- do nazwy macierzystego wodorku odpowiadającego R, jak opisano w P-65.3.2.2.2;
(2) nomenklaturą grup funkcyjnych, używając odpowiednio nazw ‘sulfoksyd’ i ‘sulfon’;
(3) nomenklaturą multiplikacyjną, za wyjątkiem sytuacji że R lub R′ są grupami alkilowymi, kiedy warunki do ich użycia są satysfakcjonujące.

Metody (1) i (3) generują preferowane nazwy.

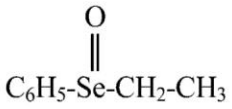
Selenowe i tellurowe analogi nazywane są w ten sam sposób, wykorzystując grupy acylowe pochodzącej od odpowiednich kwasów seleninowych, selenonowych, tellurynowych i telluronowych, oraz nazw klas ‘selenoksyd’, ‘selenon’, ‘telluroksyd’, ‘telluron’. Przedrostki takie jak ‘alkilosulfinyl’ lub ‘arylosulfonyl’ mogą być używane w ogólnej nomenklaturze.

Di- i polisulfony opisane zostały w P-68.4.3.2

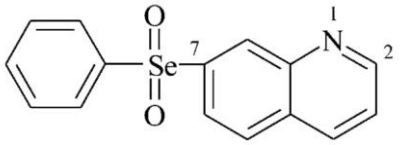
Przykłady:



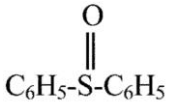
(1)1-(etanosulfinylo)butan (PIN)
1-etylosulfinylo)butan
(2) sulfooksyd butylowo-etylowy



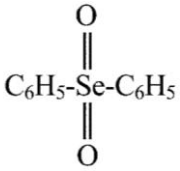
(1) (etanoseleninylo)benzen (PIN)
(etyloseleninylo)benzen
(2) selenoksyd etylowo-fenylowy



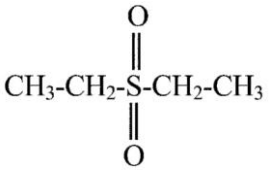
(1) 7-(benzenoselenonylo)chinolina (PIN)
7-(fenyloselenonylo)chinolina
(2) selenon chinolin-7-ylo-fenylowy
selenon 7-chinolilo-fenylowy



(3) 1,1′-sulfinylodibenzen (PIN)
(2)sulfosyd difenylowy
(1)(benzenosulfinylo)benzen
(fenylosulfinylo)benzen



(3) 1,1′-selenonylodibenzen (PIN)
(2) selenon difenylowy
(1) (benzenoselenonylo)benzen
(fenyloselenonylo)benzen



(1) (etanosulfonylo)etan (PIN)
(etylosulfonylo)etan
(2) sulfon dietylowy

Uwaga: Multiplikacja węglowodorów acyklicznych nie jest dozwolona

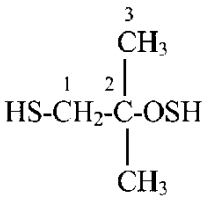
P-63.7 ZWIĄZKI WIELOFUNKCYJNE

W porządku starszeństwa klas, związki hydroksylowe i hydroperoksydy są uporządkowane w kolejności malejącej po aldehydach i ketonach, ale przed aminami i iminami. Chalkogenowe analogi są uporządkowane za każdą z tych klas, zgodnie z kolejnością atomów O, S, Se i Te. W kolejności malejącej, uporządkowane są one jak następuje:

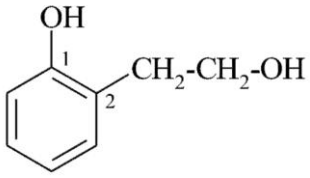
(1) związki hydroksylowe –OH, następnie ich chalkogenowe analogi, -SH > -SeH > -TeH
(2) hydroperoksydy –OOH, następnie ich chalkogenowe analogi, -SOH > -SeOH > -TeOH, itd. (zob. Tabela 6.1)
(3) aminy > iminy
(4) etery –O-, następnie ich chalkogenowe analogi, -S- > -Se- > -Te-
(5) peroksydy –OO-, następnie ich chalkogenowe analogi, -OS- > -OSe- > -OTe-, > -SS- > -SSe- > -STe- > -SeSe- > -SeTe- > -TeTe-.

Nie ma rozróżnienia starszeństwa pomiędzy fenolami i związkami hydroksylowymi. Wyboru macierzystego wodorku dokonuje się w oparciu o maksymalną liczbę grup hydroksylowych wymienianych jako przyrostki; gdy istnieje wybór, pierścień jest preferowany przed łańcuchem (zob. P-52.2.9).

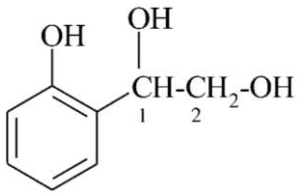
Przykłady:



2-metylo-2-(sufanyloksy)propano-1-tiol (PIN)



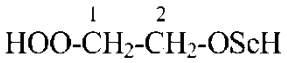
2-(2-hydroksyetylo)fenol (PIN)

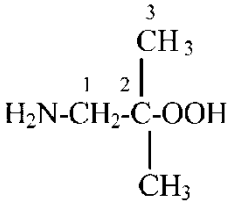


1-(2-hydroksyfenylo)etano-1,2-diol (PIN)

2-(2-hydroksyfenylo)etan-1-ol
(pierścień jest starszy względem łańcucha w preferowanej nazwie, patrz P-52.2.9)

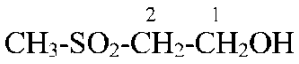
[nie 2-(1,2-dihydroksyetylo)fenol; dwie grupy główne są starsze niż jedna]



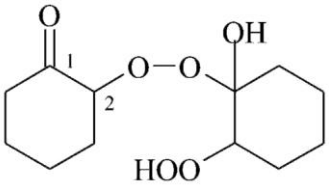


2-(selanyloksy)etano-1-peroksol (PIN)

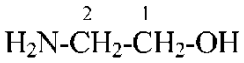
1-amino-2-metylopropano-2-peroksol (PIN)



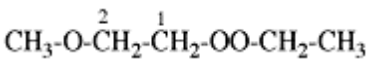
2-(metanosulfonylo)etan-1-ol (PIN)
2-(metylosulfonylo)etan-1-ol



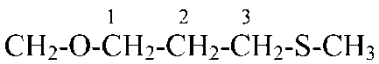
2-[(2-hydroperoksy-1-hydroksycykloheksylo)peroksy]cykloheksan-1-on (PIN)
(keton jest starszy względem alkoholi i peroksoli)



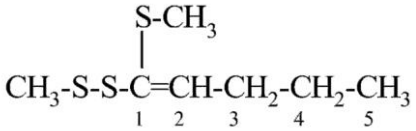
2-aminoetan-1-ol (PIN)
(nie etanoloamina)



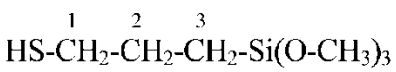
1-(etyloperoksy)-2-metoksyetan (PIN)
nie [2-(metoksyetylo)peroksy]etan;
'PIN' ma więcej podstawników)



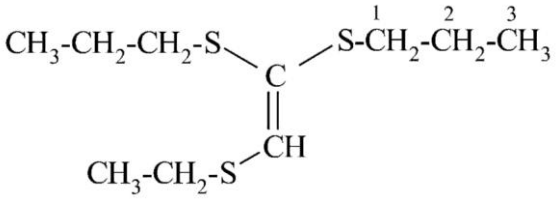
1-metoksy-3-(metylsulfanylo)propan (PIN)
1-metoksy-3-(metylotio)propan



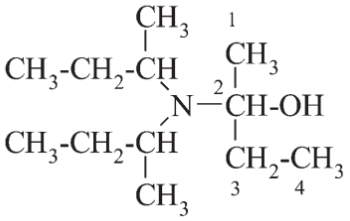
1-(metylodisulfanylo)-1-(metylsulfanylo)pent-1-en (PIN)
{nie disulfid metylowo-1-(metylosulfanylo)pent-1-en-1-ylowy;
ani 1-metylo-2-[1-(metylosulfanylo)pent-1-en-1-yl]disulfan; zob. P-41}



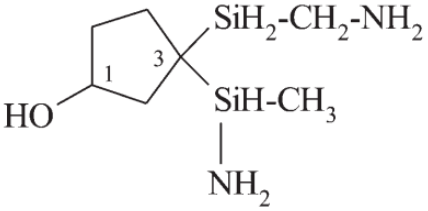
3-(trimetoksysililo)propano-1-tiol (PIN)
[nie trimetoksy(3-sulfanylopropylo)silan;
przyrostek ‘tiol’ ma pierwszeństwo przed silanem]



1-{[2-(etylsulfanylo)-1-(propylosulfanylo)eten-1-ylo]sulfanylo}propan (PIN)
(multiplikacja węglowodorów alifatycznych nie jest dozwolona)



2-[di(butan-2-ylo)amino]butan-2-ol (PIN)
2-[bis(1-metylopropylo)amino]butan-2-ol
[nie 2-(di-*sec*-butyloamino)butan-2-ol]



3-[amino(metylo)sililo]-3-[(aminometylo)sililo]cyklopentan-1-ol (PIN)
{nie 3-[(aminometylo)sililo]-3-[amino(metylo)sililo]cyklopentan-1-ol;
alfanumeryczne znaki są identyczne; w czwartym znaku nazwy, litera ‘a’
jest preferowana w otwartym nawiasie (patrz P-14.6)}

P-63.8 SOLE ZWIĄZKÓW HYDROKSYLOWYCH, ZWIĄZKÓW HYDROPEROKSY I ICH CHALKOGENOWYCH ANALOGÓW

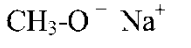
P-63.8.1 Obojętne sole związków hydroksylowych, ich chalkogenowych analogów i związków nadtlenkowych są nazywa się wymieniając nazwę anionu, jako odrębnego słowa, przed nazwą kationu(ów).

Zgodnie z P-72.2.2.2.2, anion tworzony poprzez odejmowanie hydronu od chalkogenowego atomu związku hydroksylowego lub chalkogenowego analogu, lub ze związku peroksy, który może być wyrażony przez przyrostek taki jak ‘ol’, ‘tiol’, ‘peroksol’, itp., nazywa się przez użycie przyrostka związku ‘olan’, ‘tiolan’, ‘peroksolan’, itp., utworzonej poprzez dodanie końcówki ‘an’ do przyrostka

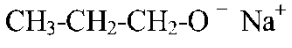
‘ol’, ‘tiol’, ‘peroksol’, itp. Przedrostki zwielokrotniające ‘bis’, ‘tris’, itp., są używane przed takimi przedrostkami związku w celu uniknięcia jakichkolwiek dwuznaczności.

Tradycyjne nazwy metoksylan, etoksylan, propoksylan, butoksylan, fenoksylan czy aminoksylan, dla CH_3-O^-, C_2H_5-O^-, C_3H_7-O^-, $C_4H_{9v}O^-$, C_6H_5-O^-, i H_2N-O^- są zachowane jako nazwy preferowane i mogą być podstawiane. Tradycyjne nazwy izopropoksylan i *tert*-butoksylan dla $(CH_3)_2CH$-O^- i $(CH_3)_3CH$-O^- są również zachowane, ale nie mogą być podstawiane.

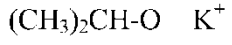
Przykłady:



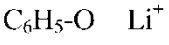
metanolan sodu
metoksylan sodu (PIN)



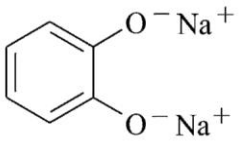
propan-1-olan sodu
propoksylan sodu (PIN)



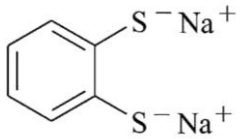
propan-2-olan potasu
izopropoksylan potasu (PIN)



fenolan litu
fenoksylan litu (PIN)



benzeno-1,2-bis(olan) disodu (PIN)

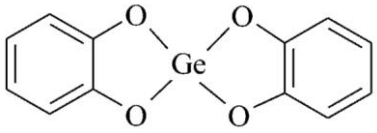


benzeno-1,2-bis(tiolan) disodu (PIN)

$(C_6H_5$-$O^-)_4Pb$ tetrafenoksylan ołowiu (PIN)

P-63.8.2 Cykliczne sole nazywa się jak heterocykle

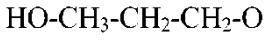
Przykład:



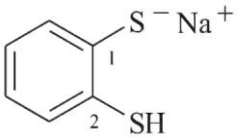
2,2′-spirobi[[1,3,2]benzodioksagermol] (PIN)

P-63.8.3 Częściowe sole polioli i ich chalkogenowych analogów nazywa się podstawnikowo na podstawie odpowiedniego anionu:

Przykłady:



3-hydroksypropan-1-olan sodu (PIN)



2-sulfanylobenzeno-1-tiolan sodu (PIN)

P-64 KETONY, PSEUDOKETONY, HETERONY I CHALKOGENOWE ANALOGI

P-64.0 Wprowadzenie
P-64.1. Definicje
P-64.2. Ketony
P-64.3 Pseudoketony
P-64.4 Heterony
P-64.5 Wyrażenie grup karbonylowych jako przedrostków
P-64.6 Chalkogenowe analogi ketonów, pseudoketonów i heteronów
P-64.7 Wielofunkcyjne ketony, pseudoketony i heterony
P-64.8 Acyloiny

P-64.0 WPROWADZENIE

Nomenklatura podstawnikowa ketonów jest dobrze opracowana. Przyrostek ‘on’ używa się do wskazania głównej grupy charakterystycznej, a przedrostek ‘okso’ używanysię gdy obecna jest grupa charakterystyczna posiadająca starszeństwo. Przyrostek ‘on’ i przedrostek ‘okso’ były bez różnicy używane do nazewnictwa pewnych klas związków innych niż ketony. Pełna systematyzacja oparta o ścisłe zastosowanie przyrostka ‘on’ do wskazania charakterystycznej grupy =O jest zalecana w tym paragrafie.

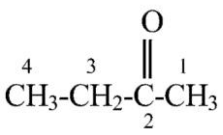
Tradycyjnie, nomenklatura ketonów była opisywana razem z aldehydami. W tych zaleceniach, te dwie klasy związków dyskutowane są osobno (dla aldehydów patrz P-66.6), aby podkreślić podobieństwa w pomiędzy kwasami karboksylowymi i aldehydami w odniesieniu do nomenklatury. Ostatecznie, w celu uniknięcia fragmentacji, nomenklatura acetali i ketali jest dyskutowana razem aldehydami w P-66.6.

Zasady dotyczące ketonów i ich chalkogenowych analogów, dyskutowane jako reguły C-311 do C-318 w Zaleceniach z 1979 roku (ref. 1) i R-5.5.2 w Zaleceniach z 1993 roku (ref. 2) zostały zastąpione przez odpowiednie zasady opisane tutaj w P-64.

P-64.1 DEFINICJE

P-64.1.1 Ketony definiowane są jako klasa związków, w których grupa karbonylowa jest związana z dwoma atomami węgla: R_2CO (R nie może być H) (zob. ref. 23).

Przykład:



butan-2-on (PIN)

P-64.1.2 Pseudoketony i heterony

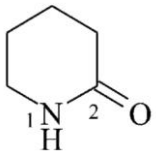
Dodanie tych dwóch nowych podklas do ogólnej klasy ketonów, klaruje ogólne zasady użycia przyrostków i przedrostków w nomenklaturze podstawnikowej, dając zawsze pierwszeństwo przyrostkom, które określają główną grupę charakterystyczną.

P-64.1.2.1 Pseudoketony

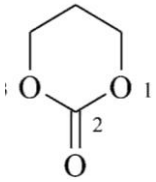
Są dwa typy pseudoketonów:

(a) związki cykliczne, w których grupa karbonylowa w pierścieniu związana jest z jednym lub dwoma heteroatomami szkieletu, lub
(b) związki, w których acykliczna grupa karbonylowa jest związana z jednym lub dwoma heteroatomami acyklicznego szkieletu, z wyjątkiem atomów azotu, halogenów, lub pseudohalogenów, lub związana jest z heteroatomem z pierścienia lub układu pierścieniowego. Kiedy heteroatomem z pierścienia jest atom azotu taki związek nazywany jest ‘nieujawnionym’ lub ‘ukrytym amidem’.

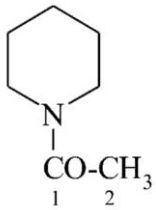
Przykłady:



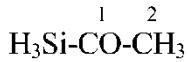
(a) piperydyn-2-on (PIN)



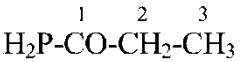
(a) 1,3-dioksan-2-on (PIN)



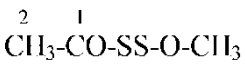
(b) 1-(piperydyn-1-ylo)etan-1-on (PIN)
1-acetylopiperydyna (‘ukryty amid’)



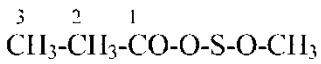
(b)1-sililoetan-1-on (PIN)
acetylosilan



(b) 1-fosfanylopropan-1-on (PIN)
propanoilofosfan



(b) 1-(metoksydisulfanylo)etan-1-on (PIN)
(patrz też P-68.4.2)

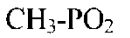


(b) 1-[(metoksysulfanyl)oksy]propan-1-on (PIN)
(patrz też P-68.4.2)

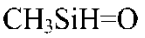
P-64.1.2.2 Heterony

Heterony są związkami posiadającymi atom tlenu formalnie związany podwójnym wiązaniem z heteroatomem (zob. P-62.3.1.3 i P-63.1.3; zob. też P-68). Nazywane są one w ten sam sposób jak ketony z wyjątkiem kiedy wyrażone są jako obowiązkowe przedrostki, takie jak sulfonylo (zob. Tabela 5.1 i P-59.1.9).

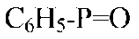
Przykłady:



metylo-λ^5-fosfanodion (PIN)
metylo(diosko)- λ^5-fosfan
(nie fosfometan)



metylosilanon (PIN)
metyl(okso)silan

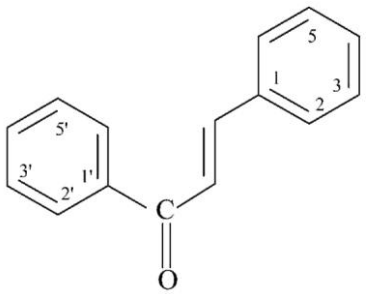


fenylofosfanon (PIN)
okso(fenylo)fosfan
(nie fosforobenzen)

P-64.2 KETONY

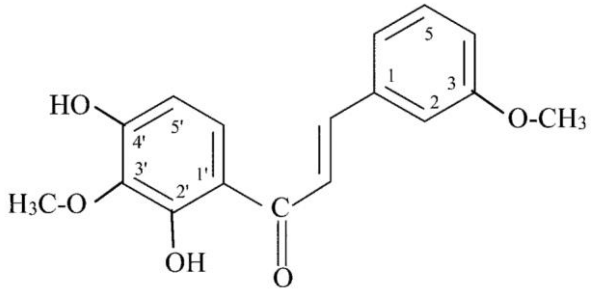
P-64.2.1 Nazwy zachowane

P-64.2.1.1 Nazwa ‘chalkon’ jest jedyną zachowaną nazwą jako preferowana przez IUPAC nazwa i jest ograniczona do podstawienia pierścienia tylko poprzez grupy charakterystyczne niższe niż ‘ketony’. Jest to stereospecyficzny *trans*- lub (*E*)-stereoizomer.

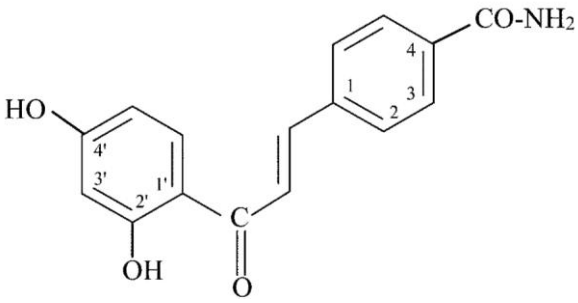


chalkon (PIN)
(2*E*)-1,3-difenyloprop-2-en-1-on

Przykłady:

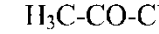


2′,4′-dihydroksy-3,3′-dimetoksychalkon (PIN)
(2*E*)-1-(2,4-dihydroksy-3-metoksyphenylo)-3-(3-metoksyfenylo)prop-2-en-1-on

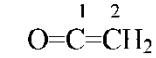


4-[(1*E*)-3-(2′.4′-dihydroksyfenylo)-3-oksoprop-1-en-1-ylo]benzamid (PIN)
(nie 2′,4′-dihydroksychalkono-4-karboksyamid)

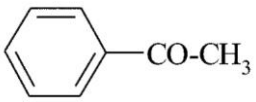
P-64.2.1.2 Do użytku w ogólnej nomenktaurze, jedynie nazwy aceton, 1,4-benzochinon, naftochinon i antrachinon są pozostawione z podstawieniem w odpowiednich strukturach. Nazwa keten jest pozostawiona, ale jedynie dla ogólnej nomenklatury, z podstawieniem zastrzeżonym dla przedrostków wymienionych w P-15.1.8.2.1. Nazwy acetofenon i benzofenon pozostawione są tylko dla ogólnej nomenklatury, ale żadne podstawienie nie jest dozowolone. Nazwy podstawnikowe, tworzone systematycznie, są preferowanymi nazwami IUPAC dla ketonów (zob. P-54.2.2).
Przykłady:



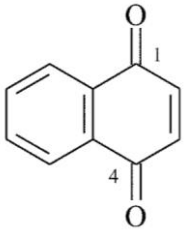
aceton
propan-2-on (PIN)

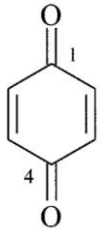


keten
etenon (PIN)



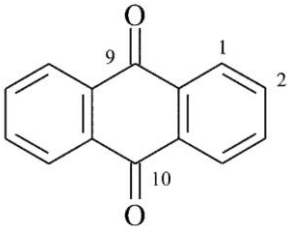
acetofenon
1-fenyloetan-1-on (PIN)



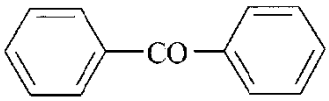


1,4-benzochinon
cykloheksa-2,5-dieno-1,4-dion (PIN)

1,4-naftochinon
(pokazany isomer 1,4)
naftaleno-1,4-dion (PIN)

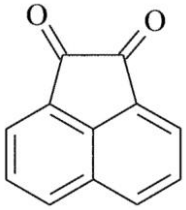


9,10-antrachinon
antraceno-9,10-dion (PIN)

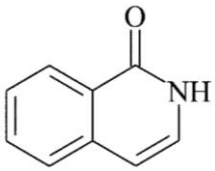


benzofenon
difenylometanon (PIN)
(nie 1,1′-karbonylodibenzen)

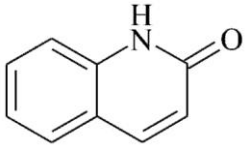
P-64.2.1.3 Podane niżej trywialne nazwy dla ketonów były używane we wcześniejszych zaleceniach, ale nie są dłużej akceptowane nawet w ogólnej nomenktalurze.



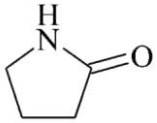
acenaftochinon
acenaftyleno-1,2-dion (PIN)



izochinolon (pokazany 1-izomer)
izochinolin-1(2*H*)-on (PIN)



chinolon (pokazany 2-izomer)
chinolin-2(1*H*)-on (PIN)



pirolidynon (pokazany 2-izomer)
pirolidyn-2-on (PIN)

C_6H_5-CO-CO-C_6H_5

CH_3-CO-CO-CH_3

benzal
1,2-difenyloetan-1,2-dion (PIN)

biacetyl
butan-2,3-dion (PIN)

C_6H_5-CO-CH_2-CH_3

propiofenon
1-fenylopropan-1-on (PIN)

P-64.2.2 Systematyczne tworzenie nazw dla ketonów

P-64.2.2.1 Acykliczne ketony

Niepodstawione acykliczne ketony nazywa się systematycznie na dwa sposoby:

(1) podstawnikowo, używając przyrostka ‘on’ lub przedrostka ‘okso’; obecność kilku charakterystycznych grup ‘on’ jest wskazywana przedrostkami zwielokrotniającymi ‘di’, ‘tri’, itd.;
(2) nomenklaturą klas funkcyjnych używając nazwy klasy ‘keton’, ‘diketon’ itd.; za nazwą klasy podstawniki wymienia się w kolejności alfabetycznej, połączone myślnikiem.

Metoda (1) generuje nazwy preferowane przez IUPAC.

Przykłady:

$^{3}CH_3$-^{2}CO-$^{1}CH_3$
propan-2-on (PIN)
keton dimetylowy
aceton

$^{4}CH_3$-$^{3}CH_2$-^{2}CO-$^{1}CH_3$
butan-2-on (PIN)
keton etylowo-metylowy
(nie keton metylowo-etylowy; grupy muszą być wymieniane w kolejności alfabetycznej)

$^{7}CH_3$-$^{6}CH_2$-$^{5}CH_2$-$^{4}CH_2$-^{3}CO-$^{2}CH_2$-$^{1}CH_3$

heptan-3-on (PIN)
keton butylowo-etylowy

$^{25}CH_3$-[CH_2]$_5$-^{19}CO-$^{17}CH_2$-^{9}CO-[CH_2]$_7$-^{7}CO-$^{1}CH_2$-CO-[CH_2]$_5$-CH_3

pentakozano-7,9,17,10-tetraon (PIN)

$^{6}CH_3$-$^{5}CH(CH_3)$-$^{4}CH_2$-$^{3}CH_2$-^{2}CO-$^{1}CH_3$

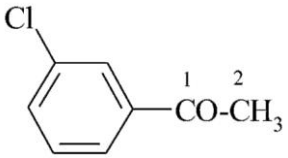
5-metyloheksan-2-on (PIN)
keton 3-metylbutylowo-metylowy
(nie keton izopentylowo-metylowy)

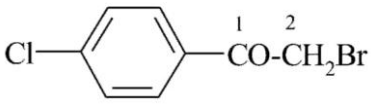
C_6H_5-$^{1}CH_2$-^{2}CO-$^{3}CH_3$

1-fenylopropan-2-on (PIN)
keton benzylowo-metylowy

C_6H_5-^{1}CO-$^{2}CH_3$

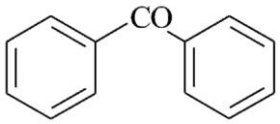
1-fenyloetan-1-on (PIN)
acetofenon (brak podstawienia)





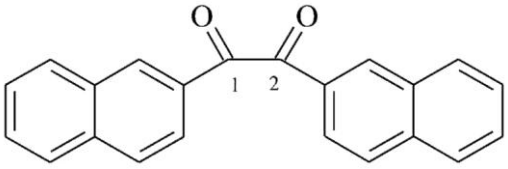
1-(3-chlorofenylo)etan-1-on (PIN)
(nie 3′-chloroacetofenon; podstawienie nie jest dozwolone dla acetofenonu)

2-bromo-1-(4-chlorofenylo)etan-1-on (PIN)
(nie bromek 4-chlorofenacylowy; nie 2-bromo-4′-chloroacetofenon; podstawienie nie jest dozwolone dla acetofenonu)

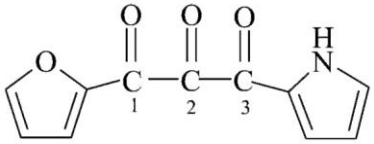


keton difenylowy

difenylometanon (PIN)



1,2-di(naftalen-2-ylo)etan-1,2-dion (PIN)
di(2-naftylo)etanodion
diketon di(2-naftylowy)



1-(furan-2-ylo)-3-(1*H*-pirol-2-ylo)propan-1,2,3-trion (PIN)
1-(2-furylo)-3-(pirol-2-ylo)propanotrion
triketon 2-furylowo-pirol-2-ilowy

P-64.2.2.2 Cykliczne ketony

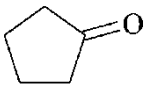
Nazwy cyklicznych ketonów tworzy się podstawnikowo z użyciem przyrostka ‘on’. Jeśli utworzenie ketonu osiągnięto w wyniku konwersji grupy metylenowej, $>CH_2$, w grupę $>C=O$, przyrostek ‘on’ z odpowiednimi lokantami dodaje się do nazwy macierzystego węglowodoru posiadającego takie grupy. Grupy metylenowe występują w pierścieniach nasyconych i systemach pierścieniowych oraz związkach mancude posiadających wskazane atomy wodoru (zob. P-14.7.1).

Związki nie posiadające odpowiednio położonych wskazanych atomów wodoru lub składające się tylko grup =CH-, muszą być uwodornione w celu utworzenia grup $>CH_2$; kiedy proces uwodornienia następuję jednocześnie z podstawieniem przez >C=O, wówczas nazywa się go ‘dodanym wskazanym atomem wodoru’. (patrz P-14.7 i P-58.2.2). Metoda ‘dodanego wskazanego atomu wodoru’ generuje nazwy preferowane przez IUPAC.

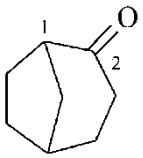
P-64.2.2.2.1 Alicykliczne ketony

Ketony pochodzące z podstawienia grup $>CH_2$ nazywa się podstawnikowo używając przyrostka ‘on’ dla oznaczenia charakterystycznej grupy głównej.

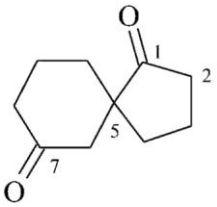
Przykłady:



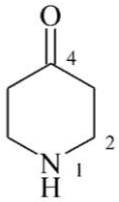
cyklopentanon (PIN)



bicyklo[3.2.1]oktan-2-on (PIN)



spiro[4.5]dekan-1,7-dion (PIN)

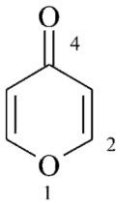


piperydyn-4-on (PIN)

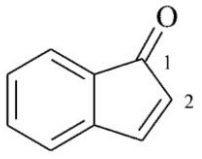
P-64.2.2.2.2 Ketony pochodzące od macierzystych wodorków ‘mancude’

Ketony pochodzące od macierzystych wodorków mancude i posiadające wskazany atom wodoru nazywa się przez bezpośrednie podstawienie grupy $>CH_2$ jak pokazano w P-64.2.2.2.1. Jeżeli nie ma wskazanego atomu wodoru, stosowana jest metoda dodanego wskazanego atomu wodoru (patrz P-14.7 i P-58.2.2).

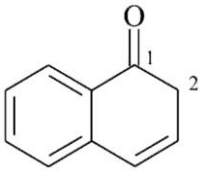
Przykłady:



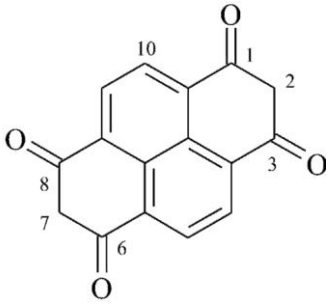
4*H*-piran-4-on (PIN)
piran-4-on



1*H*-inden-1-on (PIN)
inden-1-on



naftalen-1(2*H*)-on (PIN)
1,2-dihydronaftalen-1-on
(patrz P-58.2)

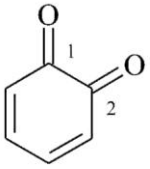


pireno-1,3,6,8(2*H*,7*H*)-tetraon (PIN)
1,2,3,6,7,8-heksahydropireno-1,3,6,8-tetraon (zob. P-58.2)

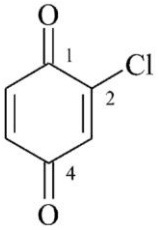
P-64.2.2.2.3 Chinony

Żadne zachowane nazwy chinonów nie są używane jako preferowane nazwy IUPAC. Nazwy 1,4-benzochinon, naftochinon i antrachinon są zachowane do użycia w ogólnej nomenklaturze, z podstawieniem. Wszystkie pozostałe chinony nazywa się systematycznie podstawnikowo zgodnie z P-64.2.2.2.2. Diketony, pochodzące od związków ‘mancude’ bez wskazanych atomów wodoru przez konwersję dwóch lub czterech grup =CH- w grupy >C=O z jakimkolwiek przegrupowaniem wiązania podwójnego do struktury chinonowej, nazywa się systematycznie (patrz P-64.2.2.2.2).

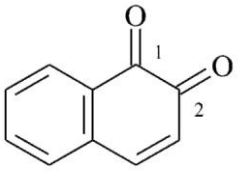
Przykłady:



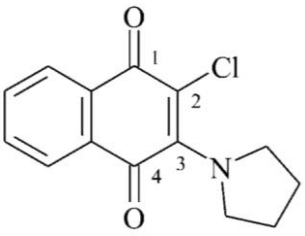
cykloheksan-3,5-dien-1,2-dion (PIN)
(nie 1,2-benzochinon)
(nie *o*-benzochinon)



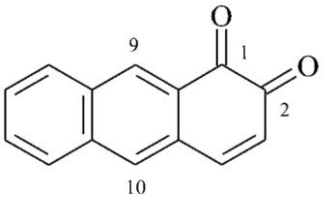
2-chlorocycloheksa-2,5-dien-1,4-dion (PIN)
2-chloro-1,4-benzochinon
(nie 2-chloro-*p*-benzochinon)



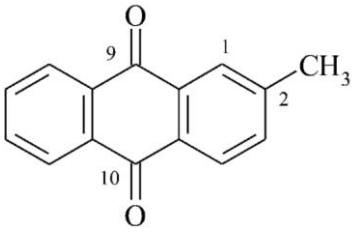
naftaleno-1,2-dion (PIN)
1,2-naftochinon



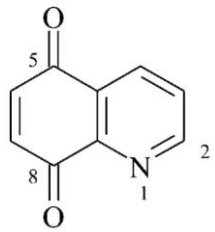
2-chloro-3-(pirolidyn-1-ylo)naftaleno-1,4-dion (PIN)
2-chloro-3-(pirolidyn-1-ylo)-1,4-naftochinon



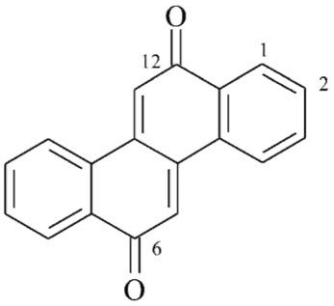
antraceno-1,2-dion (PIN)
1,2-antrachinon



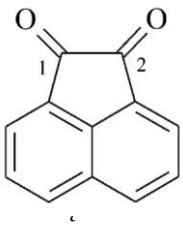
2-metyloantraceno-9,10-dion (PIN)
2-metylo-9,10-antrachinon



chinolino-5,8-dion (PIN)
(nie chinolino-5,8-chinon)



chryzeno-6,12-dion (PIN)
(nie chryzeno-6,12-chinon)

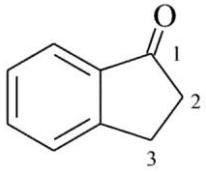


acenaftaleno-1,2-dion (PIN)
(nie acenaftochinon)

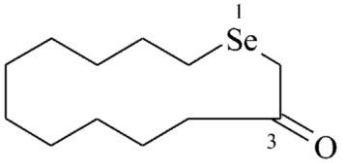
P-64.2.2.3 zeństwa przy numeracji

Kiedy istnieje wybór numeracji, punkt początkowy i kierunek numeracji związku dobiera się w taki sposób aby cechom strukturalnym (jeśli obecne) wymienionym w P-14.4 dać jak najniższe lokanty. Reguła P-52.2.8 jest stosowana kiedy wymagany jest wybór łańcucha głównego lub wyższego systemu pierścieniowego.

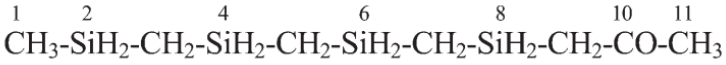
Przykłady:



2,3-dihydro-1*H*-inden-1-on (PIN; zob. P-58.2)
indan-1-on

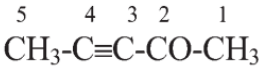


1-selenacyklotridekan-3-on (PIN)



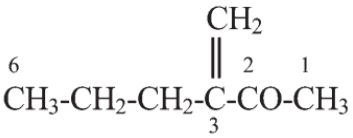
2,4,6,8-tetrasilaundekan-10-on (PIN)

but-3-en-2-on (PIN)

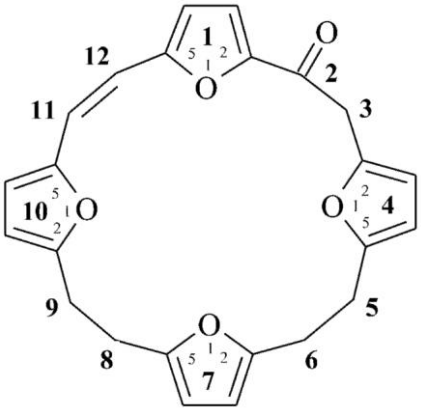


pent-3-yn-2-on (PIN)

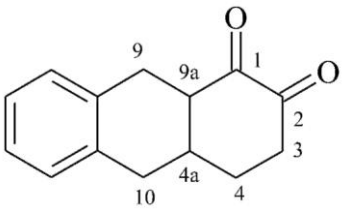
pent-1-en-4-yn-3-on (PIN)



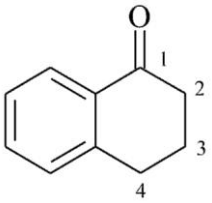
3-metylidenoheksan-2-on (PIN)



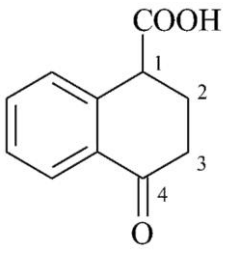
1,4,7,10(2,5)-tetrafuranacyklododekafan-11-en-2-on (PIN)



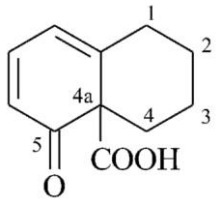
3,4,4a,9,9a,10-heksahydroantraceno-1,2-dion (PIN)
3,4,4a,9,9a,10-heksahydro-1,2-antrachinon
1,2,3,4,4a,9,9a,10-oktahydroantraceno-1,2-dion (zob. P-58.2)



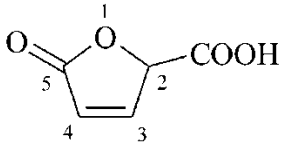
3,4-dihydronaftalen-1(2*H*)-on (PIN)
1,2,3,4-tetrahydronaftalen-1-on (zob. P-58.2)



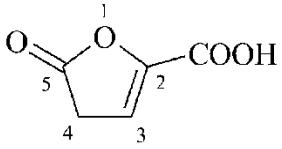
kwas 4-okso-1,2,3,4-tetrahydronaftaleno-1-karboksylowy (PIN)



kwas 5-okso-1,3,4,5-tetrahydronaftaneno-4a(2*H*)-karboksylowy (PIN)



kwas 5-okso-2,5-dihydrofurano-2-karboksylowy (PIN)

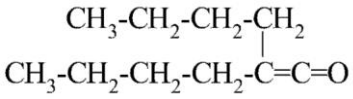


kwas 5-okso-4,5-dihydrofurano-2-karboksylowy (PIN)

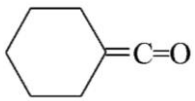
P-64.2.2.4 Keteny

Keten jest nazwą klasy związku $H_2C=C=O$ i jego pochodnych; nazwa keten może być używana w ogólnej nomenklaturze do nazywania niepodstawionych struktur i pochodnych nazywanych przez obowiązujące przedrostki (zob. Tabela 5.1). Pozostałe pochodne nazywa się według zasad nazewnictwa ketonów.

Przykłady:



2-butyloheks-1-en-1-on (PIN)
(nie dibutyloketen)



cykloheksylidenometanon (PIN)

$Br_2C=C=O$

dibromoeten-1-on (PIN)
dibromoketen

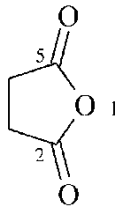
P-64.3 PSEUDOKETONY

Pseudoketony są związkami posiadającymi grupę karbonylową przyłączoną do atomu węgla i heteroatomu, -C-CO-X-, lub do dwóch heteroatomów, -X-CO-X-, gdzie X ≠ F, Cl. Br, I,

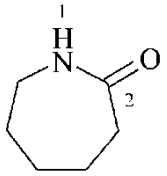
pseudohalogen, lub acykliczny N. Związki te nazywa się podstawnikowo używając, kiedy wymagane, przyrostka ‘on’, zgodnie z regułami określonymi dla ketonów.

P-64.3.1 Cykliczne bezwodniki, estry i amidy nazywa się jako pseudoketony; powstałe nazwy są nazwami preferowanymi przez IUPAC.

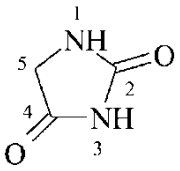
Przykłady:



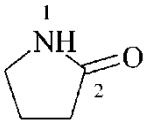
oksolano-2,5-dion (PIN)
bezwodnik bursztynowy
(patrz P-65.7.3)



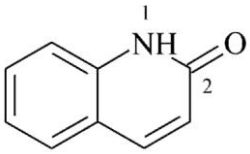
azepan-2-on (PIN)
heksano-6-laktam (patrz P-66.1.4.1)



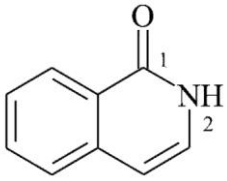
imidazolidyno-2,4-dion (PIN)



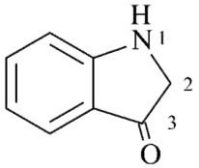
pirolidyn-2-on (PIN)
(nie 2-pirolidon)



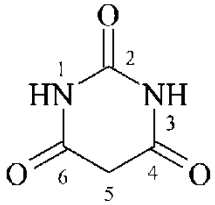
chinolin-2(1*H*)-on (PIN)
(1,2-dihydrochinolin-2-on)



izochinolin-1(2*H*)-on (PIN)
(nie 1,2-dihydroizochinolin-1-on)

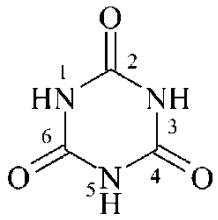


1,2-dihydro-3*H*-indol-3-on (PIN)
(nie 1*H*-indol-3(2*H*)-on; zob. P-58.2)

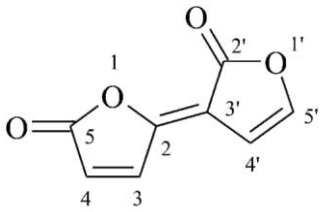


pirymidyno-2,4,6(1*H*,3*H*,5*H*)-trion

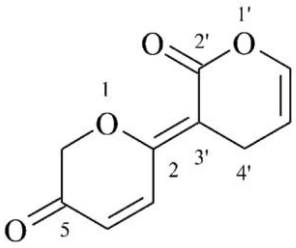
1,3-diazynane-2,4,6-trion (PIN)



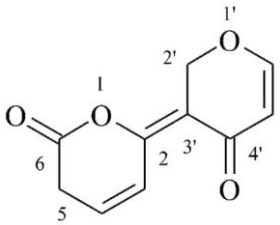
1,3,5-triazyno-2,4,6(1*H*,3*H*,5*H*)-trion
1,3,5-triazynano-2,4,6-trion (PIN)



2′*H*,5*H*-[2,3′-bifuranylideno]-2′,5-dion (PIN)



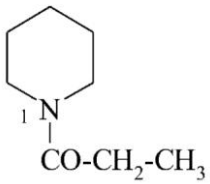
2′*H*,4′*H*-[2,3′-bipiranylideno]-2′,5(6*H*)-dion (PIN)



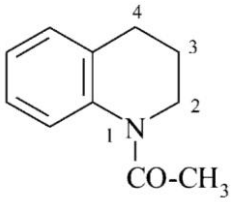
2′*H*,4′*H*-[2,3′-bipiranylideno]-4′,6(5*H*)-dion (PIN)

P-64.3.2 Acykliczne pseudoketony, włączając te w których grupa karbonylowa jest przyłączona do heteroatomu w heterocyklu (np. ukryte amidy), nazywa się podstawnikowo z użyciem przyrostka ‘on’ dla zaznaczenia głównej grupy funkcyjnej. Metoda ta jest preferowana względem użycia nazw grup acylowych, kiedy obecne, dla wskazania grupy –CO-R.

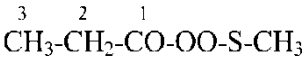
Przykłady:



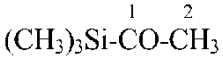
1-(piperydyn-1ylo)propan-1-on (PIN)
1-propanoilopiperydyna
1-(1-oksopropylo)piperydyna
(ukryty amid)



1-(3,4-dihydrochinolin-1(2*H*)-ylo)etan-1-on (PIN)
1-acetylo-1,2,3,4-tetrahydrochinolina
(ukryty amid)



1-[(metylosulfanylo)peroksy]propan-1-on (PIN)
(patrz też P-68.4.2.4)



1-(trimetylosililo)etan-1-on (PIN)
acetylo(trimetylo)silan

P-64.4 HETERONY

Heterony są związkami posiadającymi atom tlenu formalnie związany wiązaniem podwójnym z heteroatomem; heteroiminy patrz P-62.3.1.3; patrz też P-68.3.2.3.1 i P-68. Nazywa się w ten sam sposób jak ketony, chyba że wskazywane są obowiązujacymi przedrostkami, takimi jak sulfony (zob. Tabela 5.1 i P-59.1.9).

P-64.4.1 Acykliczne heterony
P-64.4.2 Tioketony i tlenki tioaldehydów

P-64.4.1 Acykliczne heterony są związkami posiadającymi atom węgla podwójnie związany z heteroatomem. Mogą być nazywane w dwojaki sposób:

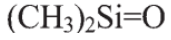
(1) dodając przyrostek ‘on’;
(2) nomenklaturą grup funkcyjnych używając nazwy ‘oksyd’ (tlenek) kiedy atom tlenu związany jest z atomem S, Se, Te, P, As, Sb lub Bi.

Metoda (1) prowadzi do nazw preferowanych przez IUPAC.

Rozróżnienie pomiędzy ketonami, ‘C-CO-C’, i aldehydami, ‘C-CHO’, nie jest zachowane dla nazewnictwa związków posiadających atom tlenu związany z heteroatomem. Wyjątkiem są sulfony, sulfonoksydy i powiązane związki chalkogenowe.

Przykłady:

(1) fosfanon (PIN, zob. P-74.2.1.4)

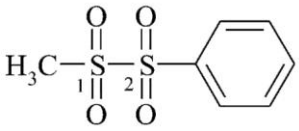


(1) dimetylosilanon (PIN)

(2) oksyd fosfanu
oksyd fosfiny

$(C_6H_5)_3PO$

(1) trifenylo-λ^5-fosfanon (PIN, zob. P-74.2.1.4)
(2) oksyd trifenylofosfanu
oksyd trifenylofosfiny



(1) 1-metylo-2-fenylo-1λ^6,2λ^6-disulfano-1,1,2,2-tetraon (PIN)
(2) disulfon metylowo-fenylowy

P-64.4.2 Oksydy tioketonów i tioaldehydów

Oksysy tioketonów nazywane są na trzy sposoby:

(1) podstawnikowo, jak heterony, używając konwencji λ i przyrostka ‘on’;
(2) nomenklaturą grup funkcyjnych, używając nazwy klasy ‘oksyd’ i ‘dioksyd’, jeśli wymagane;
(3) podstawnikowo, w oparciu o preferowane struktury macierzyste.

Metoda (1) prowadzi do nazw preferowanych przez IUPAC.

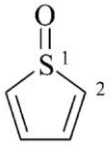
Przykład:

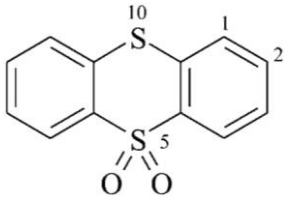
CH_3-CH_2-CH=S=O

(1) propylideno-λ^4-sulfanon (PIN)
(2) oksyd propanotialu
(3)1-(oksosulfanylideno)propan

Kiedy grupa –SO- lub –SO_2- jest częścią układu pierścieni, atom(y) tlenu wskazuje się podstawnikowo przyrostkiem ‘-on’ dodanym do nazwy heterocykla, w którym atomy siarki oznacznone są jako λ^4 lub λ^6 (patrz P-14.1.3). Metoda ta generuje nazwy preferowane przez IUPAC zamiast tych opartych o nomenklaturę klas funkcyjnych, w których nazwa klasy ‘oksyd’ następuje przed nazwą heterocykla, lub podstawnikowych używających macierzystych struktur posiadających niestandardowo związane atomy chalkogenu.

Przykłady:





1*H*-1λ^4-tiofen-1-on (PIN)
oksyd tiofenu
1-okso-1*H*-1λ^4-tiofen

5*H*-5λ^6-tiantreno-5,5-dion (PIN)
tiantreno-5,5-dioksyd
5,5-diokso-5*H*-5λ^6-tiantren

P-64.5 GRUPY KARBONYLOWE JAKO PRZEDROSTKI

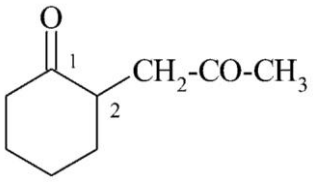
Kiedy grupa karbonylowa nie jest główną grupą charakterystyczną wskazywaną przyrostkiem, wskazuje się ją przedrostkiem. Tradycyjna grupa 'acetonylowa', CH_3-CO-CH_2-, pozostawiona jest tylko w ogólnej nomenklaturze; nazwy 'acetonylideno' i 'acetonylidyno'- nie są zalecane nawet w ogólnej nomenklaturze. W tworzeniu preferowanych przez IUPAC nazw stosuje się trzy typy przedrostków:

(1) przedrostek 'okso' kiedy podwójnie związany atom tlenu (keton, pseudoketon lub grupa heteronu) nie jest w pozycji 1 łańcucha bocznego. Możliwie najniższe lokanty przypisywane są do przyrostków, a następnie do przedrostków;
(2) grupy karbonylowe w pozycji 1 łańcucha bocznego, np. –CO-R, opisywane są nazwami odpowiednich grup acylowych (zob. P-65.5 dla nazw grup acylowych);
(3) grupa –CO- nazywana jest w nomenklaturze podstawnikowej grupą 'karbonylową'; =C=O w nomenklaturze podstawnikowej nazywana jest grupą 'oksymetylidenową'; grupa –CHO jako podstawnik nazywana jest w nomenklaturze podstawnikowej 'formylową' grupą acylową.

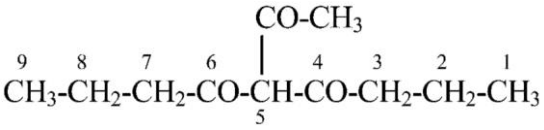
P-64.5.1 Ketony

Przedrostek 'okso' i/lub przedrostki acylo używane są do wskazania grup karbonylowych kiedy:
(a) wszystkie grupy karbonylowe lub okso grupy nie mogą być wymieniane jako przyrostki; lub
(b) w obecności grup charakterystycznych mających pierwszeństwo do wymieniania jako przyrostek.

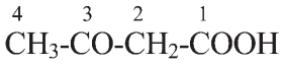
Przykłady:



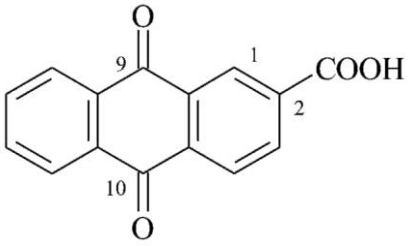
2-(2-oksopropylo)cykloheksan-1-on (PIN)
(pierścień preferowany jest przed łańcuchem; patrz P-52.2.8)
2-acetonylocykloheksan-1-on
1-(2-oksocykloheksylo)propan-2-on



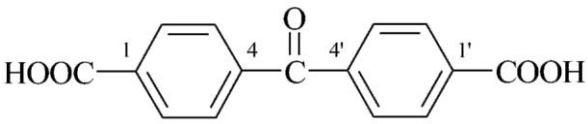
5-acetylononano-4,6-dion (PIN)
[nie 5-(1-oksoetylo)nonano-4,6-dion]



kwas 3-oksobutanowy (PIN)
(nie kwas acetylooctowy)



kwas 9,10-diokso-9,10-dihydroantraceno-2-karboksylowy (PIN)
(nie kwas 9,10-antrachinono-2-karboksylowy)



kwas 4,4′-karbonylodibenzoesowy (PIN; nazwa mnożnikowa)
kwas 4,4′-(oksometyleno)dibenzoesowy
kwas 4-(4-karboksybenzoilo)benzoesowy (nazwa podstawnikowa)

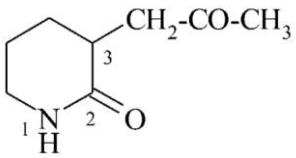
P-64.5.2 Pseudoketony

P-64.5.2.1 W cyklicznych pseudoketonach, do wskazania grupy karbonylowej używa się przedrostek ‘okso’ i/lub przedrostki grup acylowych:

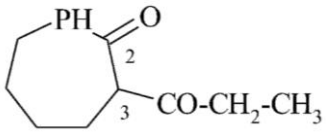
(a) kiedy wszystkie grupy karbonylowe nie mogą być wskazywane przyrostkami; lub
(b) w obecności grup charakterystycznych mających pierwszeństwo do wskazywania przyrostkiem.

Przedrostki acylowe stosuje się do nazywania pseudoketonów (‘ukrytych amidów’) o strukturze R-CO-N< gdzie atom azotu jest częścią pierścienia lub układu pierścieniowego; jednakże, metoda ta zalecana jest tylko dla ogólnej nomenklatury. Nazwy preferowane przez IUPAC tworzy się systematycznie (patrz P-64.2.2).

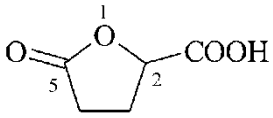
Przykłady:



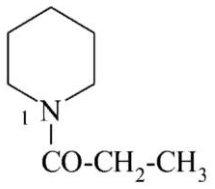
3-(2-oksopropylo)piperydyn-2-on (PIN)
(pierścień preferowany przed łańcuchem, patrz P-52.2.9)
3-acetonylopiperydyn-2-on
1-(2-oksopiperydyn-3-ylo)propan-2-on



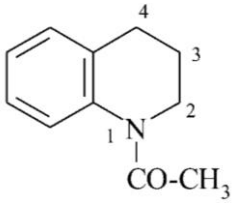
3-propanoilofosfepan-2-on (PIN)
3-propionylofosfepan-2-on



kwas 5-oksooksolano-2-karboksylowy (PIN)



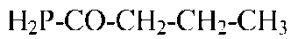
1-(piperydyn-1-ylo)propan-1-on (PIN)
1-propanoilopiperydyna
(ukryty amid)
1-propionylopiperydyna



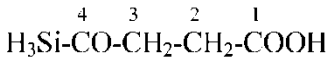
1-(3,4-dihydrochinolin-1(2*H*)-ylo)etan-1-on (PIN)
1-acetylo-1,2,3,4-tetrahydrochinolina
(ukryty amid)

P-64.5.2.2 Acykliczne pseudoketony nazywa się w ten sam sposób; zwyczajowo nazywane są one przy użyciu grup acylowych.

Przykłady:



1-fosfanylobutan-1-on (PIN)
butanoilofosfan



kwas 3-(silanokarbonylo)propanowy (PIN)
kwas 4-okso-4-sililobutanowy
kwas 3-(sililokarbonylo)propanowy

P-64.6 CHALKOGENOWE ANALOGI KETONÓW, PSEUDOKETONÓW I HETERONÓW

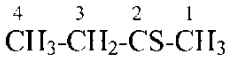
P-64.6.1 Chalkogenowe analogi ketonów, pseudoketonów i heteronów nazywa się stosując następujące przyrostki i przedrostki:

=S ‘-tion’ i ‘sulfanylideno’ (preferowane względem ‘tiokso’)
=Se ‘-selon’ i ‘selanylideno’ (preferowane względem ‘selenokso’)
=Te ‘-tellon’ i ‘tellanylideno’ (preferowane względem ‘tellurokso’)

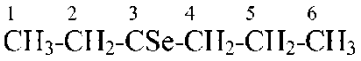
Przedrostki grup acylowych nazywa się stosując zamianę (a) funkcji, zastąpienie O przez S, Se i Te używając wrostków (patrz P-65.1.7). Użycie przedrostków zamiany funkcyjnej ‘tio’ lub ‘seleno’ z zachowaną nazwą nie jest dłużej zalecane; wszystkie preferowane przez IUPAC nazwy są konstruowane systematycznie.

Użycie przedrostków ‘sulfanylideno’, ‘selanylideno’ i ‘tellanylideno’ dla odpowiednio =S, =Se i =Te, jest zmianą przedrostka ‘okso’ dla określonych analogów chalkogenów w preferowanych nazwach IUPAC. Przedrostki ‘tiokso’ , ‘selenokso’, ‘tellurokso’ uzyskane przez nomenklaturę zamienną funkcji mogą być użyte w ogólnej nomenklaturze.

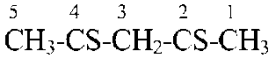
Przykłady:



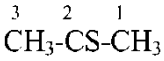
butano-2-tion (PIN)



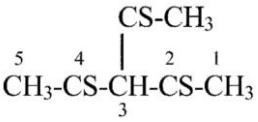
heksano-3-selon (PIN)



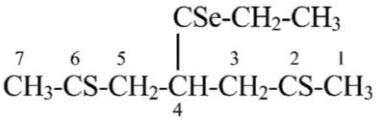
pentano-2,4-dition (PIN)



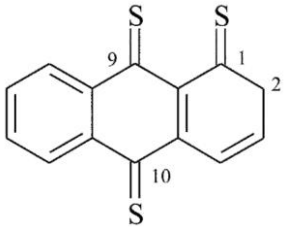
propano-2-tion (PIN)
(nie tioaceton)



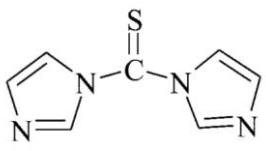
3-(etanotioilo)pentano-2,4-dition (PIN)
3-(tioacetylo)pentano-2,4-dition
3-(1-sulfanylidenoetylo)-pentano-2,4-dition



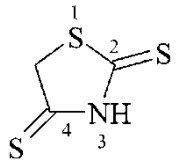
4-(propanoselenoilo)heptano-2,6-dition (PIN)
4-(1-selanylidenopropylo)heptano-2,6-dition



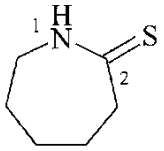
antraceno-1,9,10(2*H*)-trition (PIN)



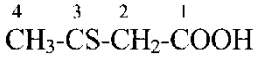
di(1*H*-imidazol-1-ilo)metanotion (PIN)



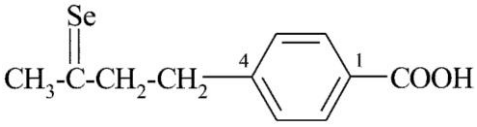
1,3-tiazolidyno-2,4-dition (PIN)



azepano-2-tion (PIN)



kwas 3-sulfanylidenobutanowy (PIN)
kwas 3-tioksobutanowy

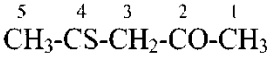


kwas 4-(3-selanylidenobutylo)benzoesowy (PIN)
kwas 4-(3-selenoksybutylo)benzoesowy

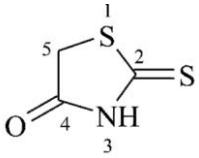
P-64.6.2 Porządek starszeństwa przyrostków

Porządek starszeństwa przyrostków ketonowych jest następujący C=O > C=S > C=Se > C=Te. Niższe lokanty sa przypisywane zgodnie z tym porządkiem.

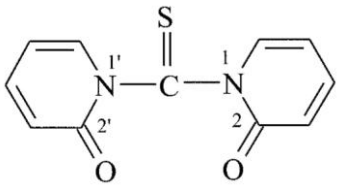
Przykłady:



4-sulfanylidenopentan-2-on (PIN)
4-tioksopentan-2-on



2-sulfanylideno-1,3-tiazolidyn-4-on (PIN)
2-tiokso-1,3-tiazolidyn-4-on

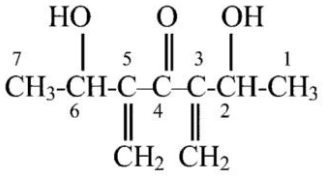


1,1′-karbonotioylodi[pirydyn-2(1*H*)-on] (PIN)
1,1′-tiokarbonylodi[pirydyn-2(1*H*)-on]

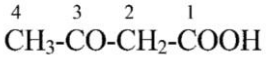
P-64.7 POLIFUNKCYJNE KETONY, PSEUDOKETONY I HETERONY

P-64.7.1 Ketony, pseudoketony i heterony, i ich chalkogenowe analogi w kolejności =O > =S > =Se > =Te, są starsze w kolejności starszeństwa klas niż związki hydroksylowe i ich chalkogenowe analogi, aminy i iminy. W obecności grup charakterystycznych posiadających pierwszeństwo w wymienianiu jako przyrostki, jak opisano w P-64.5 i P-64.6, wymienia się je jako przedrostki (patrz P-41).

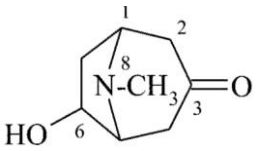
Przykłady:



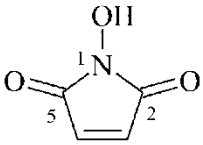
2,6-dihydroksy-3,5-dimetylidenoheptan-4-on (PIN)



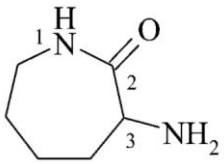
kwas 3-oksobutanowy (PIN)

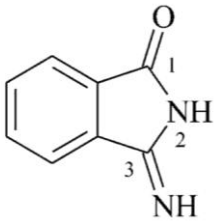


6-hydroksy-8-metylo-8-azabicyklo[3.2.1]oktan-3-on
6-hydroksy-8-metylotropan-3-on



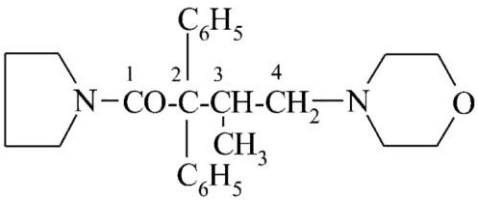
1-hydroksy-1*H*-pirolo-2,5-dion (PIN)



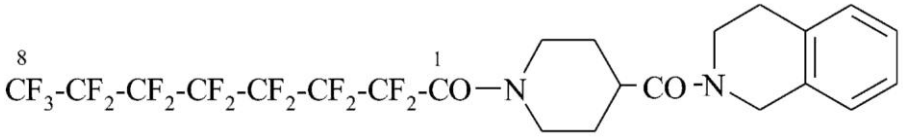


3-aminoazepan-2-on (PIN)

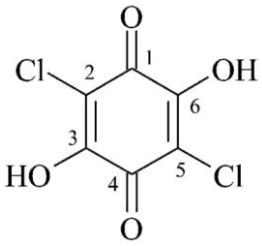
3-imino-2,3-dihydro-1*H*-izoindol-1-on (PIN)



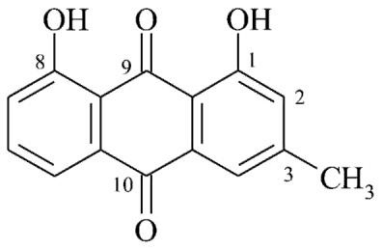
3-metylo-4-(morfolin-4-ylo)-2,2-difenylo-1-(pirolidyn-1-ylo)butan-2-on (PIN)



1-[4-(3,4-dihydroizochinolino-2-(1*H*)-karbonylo)piperydyn-1-ylo]-2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-pentadekafluorooktan-1-on (PIN, lokanty dla podstawników fluorowych są wymagane (patrz P-14.3.3)



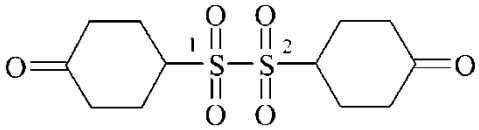
2,5-dichloro-3,6-dihydroksycykloheksa-2,5-dieno-1,4-dion (PIN)
2,5-dichloro-3,6-dihydroksy-1,4-benzochinon



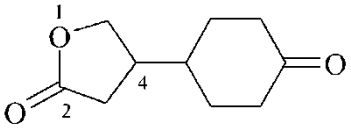
1,8-dihydroksy-3-metyloantraceno-9,10-dion (PIN)
1,8-dihydroksy-3-metylo-9,10-antrachinon

P-64.7.2 Nie ma żadnej różnicy w porządku starszeństwa pomiędzy ketonami i pseudoketonami. Jeżeli to konieczne, rozważa się, odpowiednio, maksymalną liczbę grup karbonylowych lub podwójnie związanych atomów tlenu, porządek starszeństwa pomiędzy łańcuchami i pierścieniami, oraz pomiędzy pierścieniami i systemami pierścieniowymi.

Przykłady:



1,2-bis(4-oksocykloheksylo)-1λ^6,2λ^6-disulfano-1,1,2,2-tetraon (PIN)
[heteron z czterema podwójnie związanymi atomami tlenu ma pierwszeństwo przed cykloheksanonem, który ma tylko jedną grupę karbonylową (patrz P-44.1.1)]

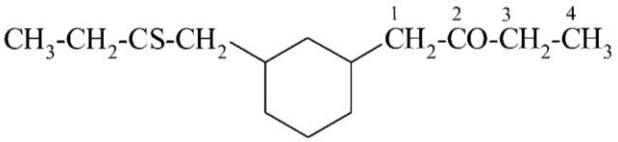


4-(4-oksocykloheksylo)oksolan-2-on (PIN)

[nie 4-(2-oksooksolan-4-ylo)cykloheksanon; pierścień heterocykliczny jest starszy względem pierścienia karbocyklicznego (zob. P-44.2.1)]

P-64.7.3 Kiedy atom tlenu w ketonie, pseudoketonie lub heteronie jest zastąpiony przez atom siarki, selenu lub telluru, porządek starszeństwa dla wyrażenia go jako przyrosteka jest następujący O > S > Se > Te.

Przykład:

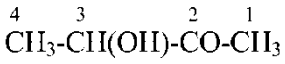


1-[3-(2-sulfanylidenobutylo)cykloheksylo]butan-2-on (PIN)
1-[3-(2-tioksobutylo)cykloheksylo]butan-2-on

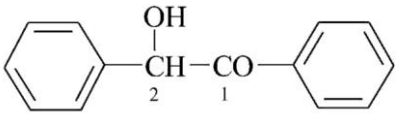
P-64.8 ACYLOINY

α-Hydroksyketony, RCH(OH)-CO-R, w których R jest grupą alkilową, arylową lub heterocykliczną, mają nazwę klasową ‘acyloiny’ i nazywa się je podstawnikowo jako podstawione ketony, zgodnie z porządkiem starszeństwa: ketony > związki hydroksylowe (patrz P-41). Nazwy kończące się na ‘oin’ nie są rekomendowane.

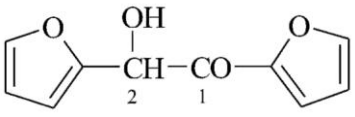
Przykłady:



3-hydroksybutan-2-on (PIN)
(nie acetoina)



2-hydroksy-1,2-difenyloetan-1-on (PIN)



1,2-di(furan-2-ylo)2-hydroksyetan-1-on (PIN)
1,2-di(2-furylo)-2-hydroksyetan-1-on

P-65 KWASY, HALOGENKI ACYLOWE I PSEUDOHALOGENKI, SOLE, ESTRY I ANHYDRYDY (BEZWODNIKI)

P-65.0 Wprowadzenie

P-65.1 Kwasy karboksylowe i analogi zamiany funkcji
P-65.2 Kwasy węglowe, cyjanowe, oraz di- i poliwęglowe
P-65.3 Kwasy siarkowe, selenowe i tellurowe z atomami chalkogenowymi bezpośrednio połączonymi z macierzystym węglowodorem
P-65.4 Grupy acylowe jako podstawniki
P-65.5 Halogenki kwasowe i pseudohalogenki
P-65.6 Sole i estry
P-65.7 Anhydrydy (bezwodniki) i ich analogi

P-65.0 WPROWADZENIE

Rozdział ten zawiera kwasy nazywane podstawnikowo za pomocą przyrostków, to jest, kwasy karboksylowe, sulfonowe, sulfinowe, oraz analogowe kwasy selenowe i tellurowe. Również ich pochodne, takie jak estry, halogenki acylowe oraz bezwodniki. W tej sekcji zawarte są sole chociaż aniony są formalnie opisane w rozdziale P-7. Kwasy węglowe nie nazywane podstawnikowo, np. kwas węglowy, kwas cyjanowy oraz di- i polinuklearne kwasy węglowe są tu również uwzględnione. Mononuklearne i polinuklearne kwasy nieorganiczne (niewęglowe) używane jako macierzyste struktury dla organicznych pochodnych dyskutowane są w P-67.

Atom wodoru grup kwasowych nie jest podstawialny dla celów nomenklatury podstawnikowej; zastąpienie kwasowych atomów wodoru przez specyficzne atomy lub grupy nazywane jest ‘funkcjonalizacją’, generując inne klasy, jak np. estry. Podstawienie ma miejsce kiedy inne atomy wodoru w strukturze są wymienione z innymi atomami lub grupami, jak zostało zilustrowane w nazwie ‘kwas chlorooctowy’.

P-65.1 KWASY KARBOKSYLOWE I ANALOGI ZAMIANY FUNKCJI

Kwasy karboksylowe mają strukturę R-C(=O)-OH, gdzie R może być atomem wodoru. Azotowe analogi są kwasami karboksylowymi, w których =O został zastąpiony =NH, $=NNH_2$, =N-OH, lub takie, w których –OH zostało zastąpione przez –NH-OH. Chalogenkowe analogi są kwasami karboksylowymi, w których jeden lub dwa atomy tlenu zostały zastąpione przez atomy siarki, selenu lub telluru.

Nazwy kwasów α-aminowych, jak również kwasów karboksylowych pochodzących od węglowodorów nie są ujęte szczegółowo w tym rozdziale. Nazwy zwyczajowe są zachowane jako zalecane w specjalistycznych publikacjach (odn. 18, 27), i są wymienione w P-10 poświęconym produktom naturalnym.

P-65.1.1 Nazwy zachowane
P-65.1.2 Nazwy systematyczne
P-65.1.3 Kwasy karboksyimidowe, karbohydrazonowe, karbohydroksymowe, i karbohydroksyamowe
P-65.1.4 Kwasy peroksykarboksylowe
P-65.1.5 Chalkogenowe analogi kwasów karboksylowych
P-65.1.6 Kwasy amidowe, anilinowe i aldehydowe
P-65.1.7 Grupy acylowe pochodzące od kwasów karboksylowych i pokrewnych
P-65.1.8 Kwas mrówkowy

P-65.1.1 Nazwy zachowane

Kwasy karboksylowe pochodzące ze źródeł naturalnych miały często nadawane zwyczajowe nazwy przypominające ich zwierzęce lub roślinne pochodzenie. W obu wydaniach z 1979 i 1993 roku, lista tych zwyczajowych nazw została znacząco zredukowana, a nazwy systematyczne stały się rekomendowanymi.

P-65.1.1.1 Nazwy zachowane jako nazwy preferowane przez IUPAC

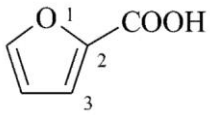
Tylko następujących pięć zachowanych nazw jest nazwami preferowanymi przez IUPAC. Wszystkie mogą być funkcjonalizowane, ale tylko kwas octowy, kwas benzoesowy i kwas oksamowy mogą być podstawiane zgodnie z P-15.1.8.2.1; zasady podstawienia odnoszące się do kwasu mrówkowego patrz P-65.1.8. Systematyczne nazwy podstawnikowe używane są do generowania kwasów modyfikowanych przez zamianę funkcji.

HCOOH	CH_3-COOH	C_6H_5-COOH
kwas mrówkowy (PIN)	kwas octowy (PIN)	kwas benzoesowy (PIN)
kwas metanowy	kwas etanowy	kwas benzenokarboksylowy

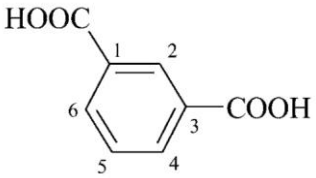
HOOC-COOH	H_2N-CO-COOH
kwas szczawiowy (PIN)	kwas oksamowy (PIN)
kwas etanodiowy	kwas amino(okso)octowy

P-65.1.1.2 Nazwy zachowane tylko dla ogólnej nomenklatury

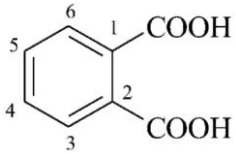
P-65.1.1.2.1 Następujące nazwy są zachowane, ale tylko dla ogólnej nomenklatury, z dozwolonym podstawieniem zgodnie z P-15.1.8.12.1 (patrz również P-34).



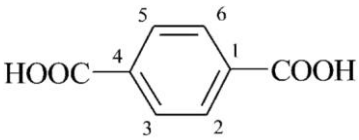
kwas 2-furoesowy (także izomer 3)
kwas furano-2-karboksylowy (PIN)



kwas izoftalowy
kwas benzeno-1,3-dikarboksylowy



kwas ftalowy
kwas benzeno-1,2-dikarboksylowy (PIN)



kwas tereftalowy
kwas benzeno-1,4-dikarboksylowy (PIN)

P-65.1.1.2.2 Następujące nazwy są zachowane dla ogólnej nomenklatury z funkcjonalizacją, ale żadne podstawienie nie jest dozwolone. Funkcjonalizacja prowadzi do bezwodników, soli i estrów, np. tworzenie estrów prowadzi do nazw takich jak maślan metylu.

CH_2=CH-COOH

kwas akrylowy
kwas prop-2-enowy (PIN)

HOOC-$[CH_2]_4$-COOH

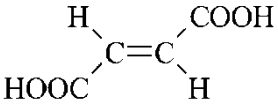
kwas adypinowy
kwas heksanodiowy (PIN)

CH_3-CH_2-CH_2-COOH

kwas masłowy
kwas butanowy (PIN)

C_6H_5-CH=CH-COOH

kwas cynamonowy (w rozumieniu kofiguracja '*E*')
kwas 3-fenyloprop-2-enowy (PIN; izomery '*E*' i '*Z*')



kwas fumarowy
kwas (2*E*)-but-2-enodiowy (PIN)

HOOC-$[CH_2]_3$-COOH

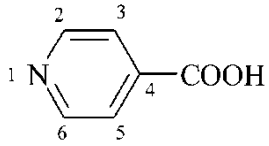
kwas glutarowy
kwas pentanodiowy

HOOC-CH_2-COOH

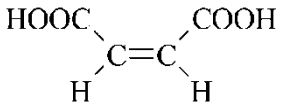
kwas malonowy
kwas propanodiowy (PIN)

CH_2=C(CH_3)-COOH

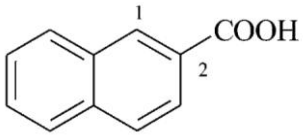
kwas metakrylowy
kwas 2-metyloprop-2-enowy (PIN)



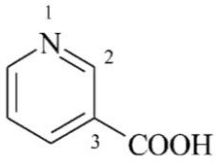
kwas izonikotynowy
kwas pirydyno-4-karboksylowy (PIN)



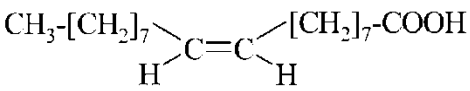
kwas maleinowy
kwas (2*Z*)-but-2-enodiowy (PIN)



kwas 2-naftoesowy (także izomer 1-)
kwas naftaleno-2-karboksylowy (PIN)



kwas nikotynowy
kwas pirydyno-3-karboksylowy (PIN)



kwas oleinowy
kwas (9*Z*)-oktadec-9-enowy (PIN)

CH_3-$[CH_2]_{14}$-COOH

kwas palmitynowy
kwas heksadekanowy (PIN)

CH_3-CH_2-COOH

kwas propionowy
kwas propanowy (PIN)

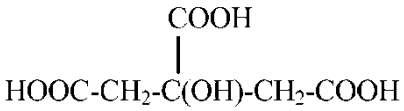
CH_3-$[CH_2]_{16}$-COOH

HOOC-CH_2-CH_2-COOH

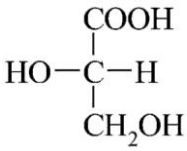
kwas stearynowy
kwas oktadekanowy (PIN)

kwas bursztynowy
kwas butanodiowy (PIN)

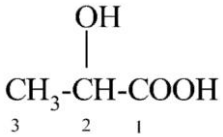
P-65.1.1.2.3 Nazwy kwas cytrynowy, kwas mlekowy, kwas glicerynowy, kwas pirogronowy i kwas winowy, odnoszące się do naturalnych produktów, są również zachowane; żadne podstawienie nie jest zalecane, ale dozwolone jest tworzenie soli i etrów.



kwas cytrynowy
kwas 2-hydroksypropano-1,2,3-trikarboksylowy (PIN)



kwas glicerynowy
kwas 2,3-dihydroksypropanowy (PIN)

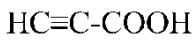


kwas mlekowy
kwas 2-hydroksypropanowy (PIN)

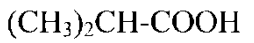
kwas pirogronowy
kwas 2-oksopropionowy (PIN)

kwas winowy
kwas 2,3-dihydroksybutanodiowy (PIN)
(wskazanie konfiguracji patrz P-102.5.6.6.5)

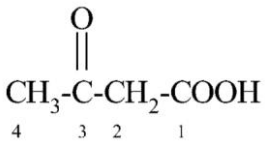
P-65.1.1.2.4 Następujące nazwy zwyczajowe nie są dłużej zalecane



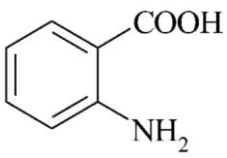
kwas propiolowy
kwas prop-2-ynowy (PIN)



kwas izomasłowy
kwas 2-metylopropanowy (PIN)



kwas acetylooctowy
kwas 3-oksobutanowy (PIN)



kwas antranilowy (tylko izomer-1,2)
kwas 2-aminobenzoesowy (PIN)

kwas benzilowy

$(C_6H_5)_2C(OH)$-COOH

kwas hydroksylo(difenylo)octowy (PIN)

$(HOOC\text{-}CH_2)_2$-N-CH_2-CH_2-N-$(CH_2\text{-}COOH)_2$

kwas etylenodiaminotetraoctowy
N,*N*′-etano-1,2-diylobis[*N*-(karboksymetylo)glicyna]

HO-CH_2-COOH

kwas glikolowy
kwas hydroksyoctowy (PIN)

OHC-COOH

kwas glioksylowy
kwas oksooctowy (PIN)

CH_3-CO-OOH

kwas peroctowy
kwas etanoperoksowy (PIN)

C_6H_5-CO-OOH

kwas perbenzoesowy
kwas benzenokarboperoksowy (PIN)

H-CO-OOH

kwas permrówkowy
kwas metanoperoksowy (PIN; patrz P-65.1.4.1)

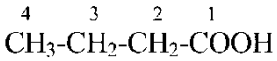
Zachowane są również nazwy kwasów α-aminowych powiązanych z peptydami i białkami (patrz P-103). Niektóre nazwy, np. ‘glicyna’ dla H_2N-CH_2-COOH, są używane do tworzenia systematycznych nazw podstawnikowych (patrz P-103.2). Nazwy kwasów karboksylowych pochodzących od zachowanych nazw węglowodorów są również używane w systematycznych nazwach podstawnikowych (zob. P-102.5.6.6).

P-65.1.2 Nazwy systematyczne

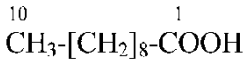
Kwasy karboksylowe nazywa się podstawnikowo wymieniając słowo kwas na początku nazwy i stosując przyrostki ‘owy’ lub ‘karboksylowy’, natomiast przedrostek ‘karboksy’ stosuje się do określenia grup karboksylowych, jeśli nie mogą być one włączone do nazwy jako główna grupa charakterystyczna lub do zaznaczenia obecności grupy karboksylowej w przypadku występowania głównej grupy charakterystycznej o wyższym priorytecie.

P-65.1.2.1 Grupy karboksylowe, -COOH, które formalnie zastępują grupę CH_3 w metanie lub są końcową grupą w nierozgałęzionym łańcuchu węglowodoru nazywa się zastępując końcowe ‘an’ w nazwie odpowiedniego węglowodoru końcówką ‘owy’. Nie ma potrzeby używania lokantów do określenia położenia grup karboksylowych w łańcuchu węglowodorowym, lokanty używane są wówczas, gdy łańcuch węglowodorowy został zmodyfikowany w wyniku zamiany szkieletu, co wyjaśniono w rozdziale P-15.4.3.2.3. Za wyjątkiem kwasów: mrówkowego, octowego, szczawiowego (zob. P-65.1.1.1) i kwasu oksamowego (zob. P-65.1.1.1) nazwy tworzone systematycznie są preferowanymi nazwami IUPAC; nazwy opisane w rozdziale P-65.1.1.2 są nazwami zachowanymi stosowanymi zgodnie z nomenklaturą ogólną.

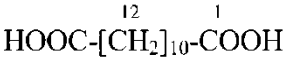
Przykłady:



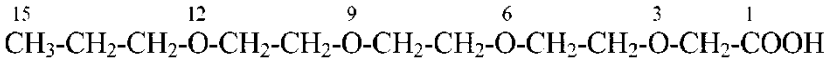
kwas butanowy (PIN)
kwas masłowy



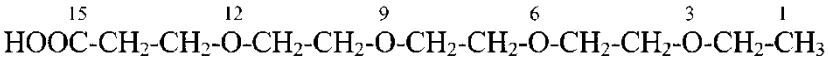
kwas dekanowy (PIN)



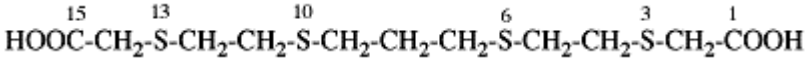
kwas dodekanodiowy (PIN)



kwas 3,6,9,12-tetraoksapentadekan-1-owy (PIN)



kwas 3,6,9,12-tetraoksapentadekan-15-owy (PIN)

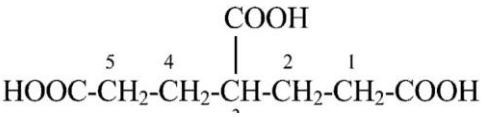


kwas 3,6,10,13-tetratiapentadekano-1,15-dioic acid (PIN)

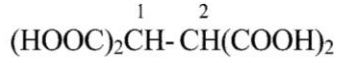
P-65.1.2.2 Przyrostek ‘karboksylowy’ w nazwie kwasu stosuje się dla wszystkich kwasów karboksylowych, które nie mogą być nazwane zgodnie z zasadami ujętymi w P-65.1.2.1, z wyjątkiem nazwy kwas benzoesowy, będącej nazwą zachowaną (zob. P-65.1.1.1). Grupa karboksylowa może być połączona z każdym atomem, atomem węgla lub heteroatomem, jakiegokolwiek macierzystego wodorku. W przypadku wodorków macierzystych typu ‘mancude’, należy zastosować odpowiednią procedurę jak w P-65.1.2.3.

P-65.1.2.2.1 Jeżeli więcej niż dwie grupy karboksylowe są przyłączone do nierozgałęzionego łańcucha węglowodorowego to wszystkie grupy karboksylowe wskazuje się dodając do nazwy macierzystego wodorku słowo kwas i przyrostek ‘karboksylowy’ poprzedzony odpowiednim przedrostkiem zwielokrotniającym: ‘tri’, ‘tetra’, itd., oraz odpowiednimi lokantami.

Przykłady:



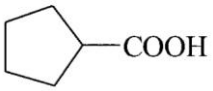
kwas pentano-1,3,5-trikarboksylowy (PIN)



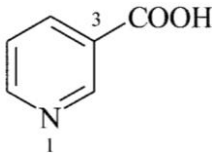
kwas etano-1,1,2,2-tetrakarboksylowy (PIN)

P-65.1.2.2.2 Grupy karboksylowe przyłączone do cyklicznych lub heteroacyklicznych macierzystych wodorków zawsze wskazuje się przyrostkiem ‘karboksylowy’

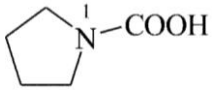
Przykłady:



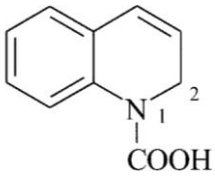
kwas cyklopentanokarboksylowy (PIN)



kwas pirydyno-3-karboksylowy (PIN)
kwas nikotynowy



kwas pirolidyno-1-karboksylowy (PIN)



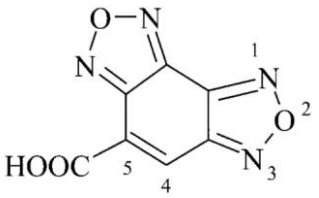
kwas chinolino-1(2*H*)-karboksylowy (PIN)

$H_3Si\text{-}O\text{-}SiH_2\text{-}COOH$

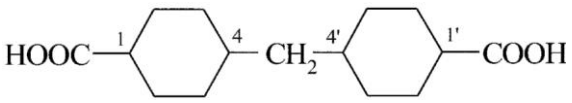
kwas disiloksanokarboksylowy (PIN)

$H_2N\text{-}NH\text{-}COOH$

kwas hydrazynokarboksylowy (PIN)
kwas karbonohydrazydowy (patrz P-65-2.1.4)
(nie: kwas karbazowy)



kwas benzo[1,2-*c*:3,4-*c*′]bis([1,2,5]oksadiazolo)-5-karboksylowy (PIN)

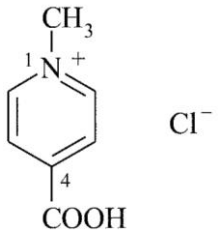


kwas 4,4′-metylenodi(cykloheksano-1-karboksylowy) (PIN)

P-65.1.2.2.3 Przedrostki ‘karboksy’ i ‘oksalo’

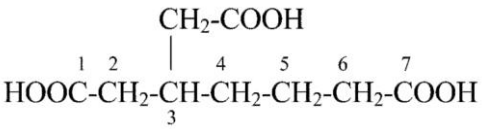
Jeśli obecna jest inna grupa, mająca pierwszeństwo do wskazywania przyrostkiem, na przykład wolna walencyjność, lub jeśli nie wszystkie grupy karboksylowe można wskazać przyrostkami, to grupę karboksylową –COOH określa się preferowanym przedrostkiem ‘karboksy’ (używanego także w nomenklaturze ogólnej). Przedrostek ‘oksalo’ zalecany jest jako przedrostek preferowany dla grupy –CO-CO-OH, ale nie można go wykorzystać do wydłużenia łańcucha węglowego. W nomenklaturze ogólnej można stosować, zespolony przedrostek ‘karboksykarbonyl, ale już nie zaleca się zespolonego przedrostka ‘karboksyformyl’ .

Przykłady:

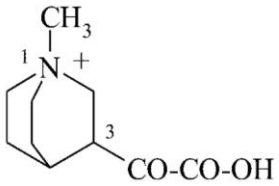


Cl^- chlorek 4-karboksy-1-metylopirydyn-1-ium (PIN)

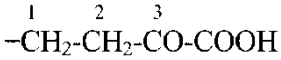
$-CH_2-CH_2-COOH$ 2-karboksyetyl (preferowany przedrostek)



kwas 3-(karboksymetylo)heptanodiowy (PIN)



1-metylo-3-oksalobicyklo[2.2.2]oktan-1-ium (PIN)

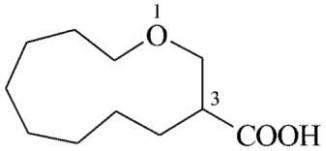


3-karboksy-3-oksopropyl (zalecany przedrostek)
(nie: 2-oksaloetyl)

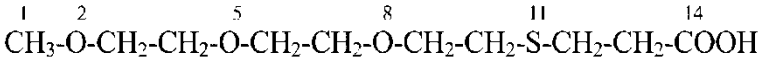
P-65.1.2.3 Porządek starszeństwa w numeracji

Jeśli jest to wymagane, numerowanie stosuje się zgodnie z porządkiem starszeństwa opisanym w P-14.4.

Przykłady:

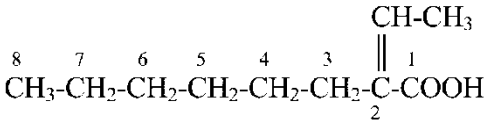


kwas 1-oksacykloundekano-3-karboksylowy (PIN)

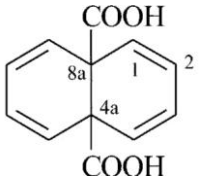


kwas 2,5,8-trioksa-11-tiatetradekan-14-owy (PIN)

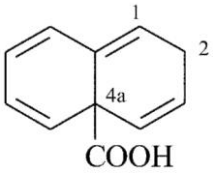
Heteroatomy w łańcuchu obecnie uważa się za integralną część macierzystego wodorku i jako takie mają w numeracji pierwszeństwo przed przyrostkami (patrz P-14.4; patrz także P-15.4).



kwas 2-etylidenooktanowy (PIN)
[nie: kwas 2-heksylobut-2-enowy; patrz P-44.3, kryterium (b)]



kwas naftaleno-4a,8a-dikarboksylowy (PIN; patrz P-58.2)
kwas 4a,8a-dihydronaftaleno-4a,8a-dikarboksylowy

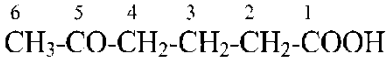


kwas naftaleno-4a(*2H*)-karboksylowy (PIN; patrz P-58.2)
kwas 2,4a-dihydronaftaleno-4a-karboksylowy

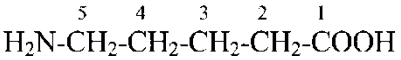
P-65.1.2.4 Wielofunkcyjne kwasy karboksylowe

Nazwy systematyczne podstawionych kwasów karboksylowych tworzy się dodając odpowiednie przedrostki takie jak: ‘hydroksy’, ‘amino’, ‘imino’, ‘halo’, ‘nitro’, itd., do nazwy kwasu. Przedrostków nie szereguje się jako jednostek funkcyjnych, ale wymienia się w nazwach w porządku alfabetycznym (wyjątek stanowi hydro/dehydro), który jest również wykorzystywany (jeżeli potrzeba) do przypisania najniższych lokantów.

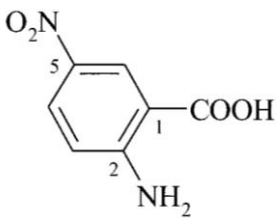
Przykłady:

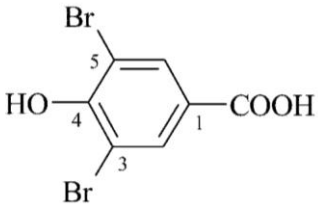


kwas 5-oksoheksanowy (PIN)



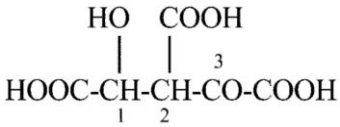
kwas 5-aminopentanowy (PIN)





kwas 3,5-dibromo-4-hydroksybenzoesowy (PIN)

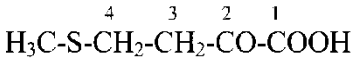
kwas 2-amino-5-nitrobenzoesowy (PIN)
(nie: kwas 5-nitroantranilowy: kwas antranilowy nie jest nazwą zachowaną)



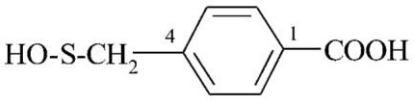
kwas 1-hydroksy-3-oksopropano-1,2,3-trikarboksylowy (PIN)
[nie: kwas 3-hydroksy-1-oksopropano-1,2,3-trikarboksylowy: najniższe lokanty przypisuje się przedrostkom, które jako pierwsze wymienia się w nazwie, patrz P-14.4 (g)]

$(HO\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}O)_2CH\text{-}COOH$

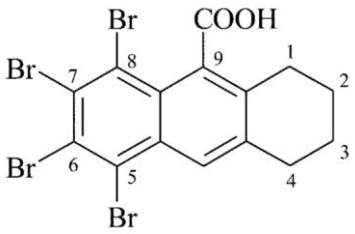
kwas bis(2-hydroksyetoksy)octowy (PIN)



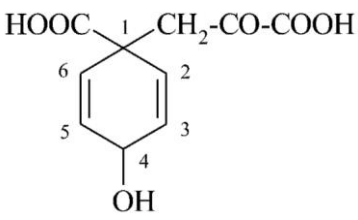
kwas 4-(metylosulfanylo)-2-oksobutanowy (PIN)
[nie: kwas 4-(metylotio)-2-oksomasłowy]



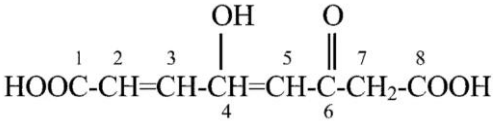
kwas 4-[(hydroksysulfanylo)metylo]benzoesowy (PIN)
[nie: kwas 4-(sulfenometylo)benzoesowy]



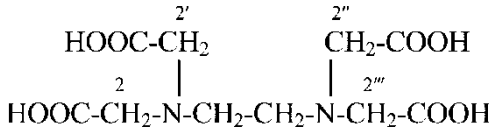
kwas 5,6,7,8-tetrabromo-1,2,3,4-tetrahydroantraceno-9-karboksylowy (PIN)
(nie: kwas 1,2,3,4-tetrabromo-5,6,7,8-tetrahydroantraceno-9-karboksylowy. Przedrostki hydro/dehydro wymienia się przed innymi przedrostkami rozłącznymi i otrzymują możliwie najniższe lokanty; patrz P-14.4)



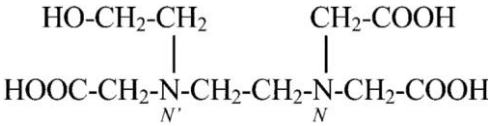
kwas 1-(2-karboksy-2-oksoetylo)-4-hydroksycykloheksa-2,5-dieno-1-karboksylowy (PIN)
kwas 1-karboksy-4-hydroksy-α-oksocykloheksa-2,5-dienopropanowy (nazwa łączona, patrz P-15.6)



kwas 4-hydroksy-6-oksookta-2,4-dienodiowy (PIN)
(nie: kwas 5-hydroksy-3-oksookta-4,6-dienodiowy; nienasycenie jest starsze od przedrostków rozłączonych w kolejności numerowania)



kwas 2,2′,2″,2‴-(etano-1,2-diylodinitrylo)tetraoctowy (patrz P-15.3.2.1)
N,*N*′-etano-1,2-diylobis[*N*-(karboksymetylo)glicyna]



N-(karboksymetylo)-*N*′-(2-hydroksyetylo)-*N*,*N*′-etano-1,2-diyloglicyna
kwas 2,2′-({2-[(karboksymetylo)(2-hydroksyetylo)amino]etylo}azanodiylo)di octowy

P-65.1.3 Kwasy karboksyimidowe, karbohydrazonowe, karbohydroksymowe i karbohydroksyamowe

P-65.1.3.1 Kwasy karboksyimidowe

P-65.1.3.1.1 Nomenklatura podstawnikowa, reguła przyrostka

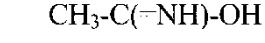
Nazwę kwasu, w którym karbonylowy atom węgla grupy karboksylowej został zamieniony na =NH tworzy się zgodnie z zasadami nomenklatury zamiennej funkcji, stosując wrostek ‘imid(o)’ aby zamienić końcówkę ‘owy’ w nazwie zachowanej kwasu; przyrostek ‘karboksylowy’ w nazwie systematycznej kwasu na odpowiednio ‘imidowy’ oraz ‘karboksyimidowy’,

Preferowane nazwy kwasów imidowych wywodzą się z systematycznych podstawnikowych nazw kwasów karboksylowych preferowanych przez IUPAC.

Stosowanie nazw systematycznych zgodnie z nomenklaturą podstawnikową dla kwasów imidowych stanowi zmianę w przypadku kwasów mrówkowego, octowego, benzoesowego oraz szczawiowego.

Przykłady:

kwas metanoimidowy (PIN)



kwas etanoimidowy (PIN)

kwas formimidowy

C_6H_5-C(=NH)-OH

kwas benzenokarboksyimidowy (PIN)
kwas benzimidowy

kwas acetoimidowy

CH_3-CH_2-CH_2-C(=NH)-OH

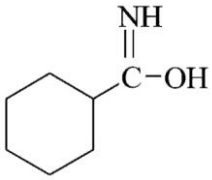
kwas butanoimidowy (PIN)
kwas butyroimidowy

HO-C(=NH)-CH_2-CH_2-C(=NH)-OH

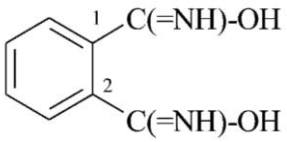
kwas butanodiimidowy (PIN)
kwas sukcynoimidowy

HO-C(=NH)-C(=NH)-OH

kwas etanodiimidowy (PIN)
kwas oksaloimidowy



kwas cykloheksanokarboksyimidowy (PIN)



kwas benzeno-1,2-dikarboksyimidowy (PIN)
kwas ftaloimidowy

Jeśli obecne są inne grupy o wyższym starszeństwie w porządku starszeństwa grup głównych, stosuje się następujące reguły dla przedrostków:

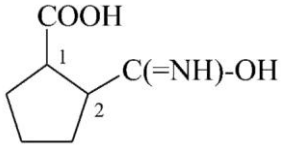
(1) zespolony przedrostek '*C*-hydroksykarbonoimidoil' użyty do wskazania grupy acylowej –C(=NH)-OH tworzony jest w wyniku powiązania wykorzystującego prosty przedrostek 'karbonoimidoil',–C(=NH)-, wywodzącego się z kwasu karbonoimidowego (patrz P-65.2.1.5).

(2) połączenie prostych przedrostków 'hydroksy' i 'imino' na końcu nazwy łańcucha węglowego stosuje się w preferowanych nazwach IUPAC zamiast zespolonego przedrostka '*C*-hydroksykarbonoimidoil'.

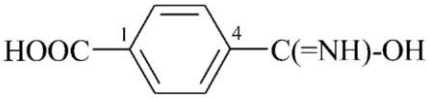
Uwaga 1: Literę '*C*' pisze się kursywą aby uniknąć możliwego pomieszania z podstawieniem *N*-hydroksy.

Uwaga 2: Nazwa 'karbonohydroksyimidoil' dla –C(=NH)-OH, nie znajduje zastosowania do tworzenia preferowanych nazw IUPAC

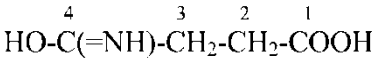
Przykłady:



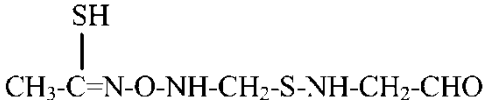
(1) kwas 2-(*C*-hydroksykarbonoimidoilo)cyklopentano-1-karboksylowy (PIN)



(1) kwas 4-(*C*-hydroksykarbonoimidoilo)benzoesowy (PIN)



(2) kwas 4-hydroksy-4-iminobutanowy
(1) kwas 3-(*C*-hydroksykarbonoimidoilo)propanowy



kwas *N*-{[({[(2-oksoetylo)amino]sulfanylo}amino]oksy}etanoimidotiowy (PIN)
(patrz P-65.1.3.1.1; P-65.1.5.2)

P-65.1.3.2 Kwasy karbohydrazonowe

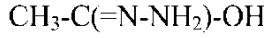
P-65.1.3.2.1 Nomenklatura podstawnikowa, metoda przyrostków

Nazwa kwasu, w którym karbonylowy atom tlenu grupy karboksylowej został zastąpiony przez $=NNH_2$ tworzy się według nomenklatury zamiennej funkcji. Wrostek ‘hydrazon(o)’ stosuje się do modyfikacji końcówki ‘owy’ w zachowanych nazwach kwasów; przyrostki ‘owy’ i ‘karboksylowy’ w nazwach systematycznych kwasów zamienia się na : ‘hydrazonowy’ lub ‘karbohydrazonowy’.

Preferowane nazwy IUPAC kwasów hydrazonowych wywodzą się z systematycznych nazw kwasów karboksylowych preferowanych przez IUPAC.

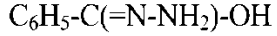
Stosowanie systematycznych nazw podstawnikowych dla kwasów hydrazonowych jest zmianą dla kwasu mrówkowego, kwasu octowego, kwasu benzoesowego oraz kwasu szczawiowego

Przykłady:

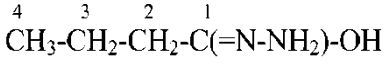


kwas metanohydrazonowy (PIN)
kwas formohydrazonowy

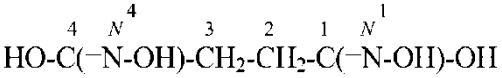
kwas etanohydrazonowy (PIN)
kwas acetohydrazonowy



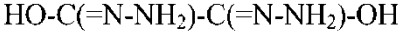
kwas benzenokarbohydrazonowy (PIN)
kwas benzohydrazonowy



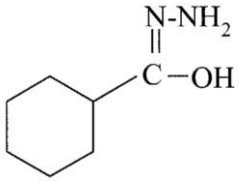
kwas butanohydrazonowy (PIN)
kwas butyrohydrazonowy



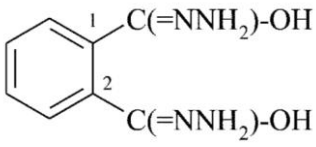
kwas butanodihydrazonowy (PIN)
kwas sukcynohydrazonowy



kwas etanodihydrazonowy (PIN)
kwas oksalohydrazonowy



kwas cykloheksanokarbohydrazonowy (PIN)



kwas benzeno-1,2-dikarbohydrazonowy (PIN)
kwas ftalohydrazonowy

P-65.1.3.2.2 Nomenklatura podstawnikowa, metoda przedrostków

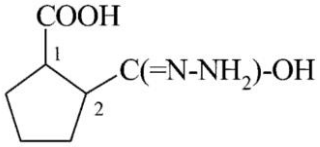
Jeśli obecna jest inna grupa, o wyższym priorytecie wymieniania jako grupa główna, wówczas stosuje się następujące przedrostki:

(1) przedrostek zespolony ‘C-hydroksykarbonohydrazonoil’ stosowany do zapisu grup acylowych –C(=N-NH$_2$)-OH tworzy się w wyniku powiązania w oparciu o podstawowy przedrostek ‘karbonohydrazonoil’, -C(=NNH$_2$)-, pochodzący od nazwy kwasu karbonohydrazonowego (patrz P-65.2.1.5). Nazwa podstawnikowa ‘hydrazynylideno(hydroksy)metyl’ może być stosowana w nomenklaturze ogólnej;

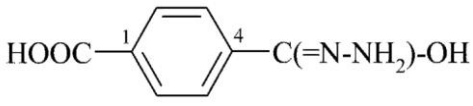
(2) kombinacja prostych przedrostków ‘hydroksy’ oraz ‘hydrazynylideno’ z nazwą łańcucha węglowodorowego tworzy nazwę preferowaną przez IUPAC, natomiast nie zalecane są przedrostki zespolone: ‘*C*-hydroksykarbonohydrazonoil’ lub ‘hydrazynylideno(hydroksy)metyl’.

Uwaga: Literę ‘*C*’ pisze się kursywą aby uniknąć możliwego pomieszania z podstawieniem *N*-hydroksy.

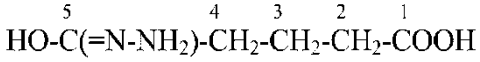
Przykłady:



(1) kwas 2-(*C*-hydroksykarbonohydrazonoilo)cyklopentano-1-karboksylowy (PIN)



(1) kwas 4-(*C*-hydroksykarbonohydrazonoilo)benzoesowy (PIN)



(2) kwas 5-hydrazynylideno-5-hydroksypentanowy (PIN)
(1) kwas 4-(*C*-hydroksykarbonohydrazonoilo)butanowy

P-65.1.3.3 Kwasy karbohydroksymowe

P-65.1.3.3.1 Nomenklatura podstawnikowa, metoda przyrostków

Kwasy, w których karbonylowy atom tlenu grupy karboksylowej zastąpiony został przez =N-OH nazywa się jak *N*-hydroksy pochodne kwasów amidowych, opisane w P-65.1.3.1. Metodą tą tworzy się nazwy preferowane przez IUPAC.

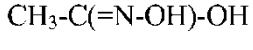
Uwaga: Obecnie nie zaleca się zestawionych poniżej reguł do tworzenia preferowanych nazw IUPAC

(1) zmodyfikowanie w zachowanej nazwie kwasu końcówki ‘owy’ na przyrostek ‘hydroksymowy’. Literę ‘o’ wstawia się przed przyrostek ‘hydroksymowy’ celem uniknięcia połączenia fonetycznego trudnego do wymowy;

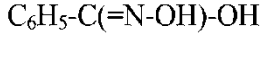
(2) używanie przyrostków ‘hydroksymowy’ oraz ‘karbohydroksymowy’ dołączanych do nazwy macierzystego wodorku.

Opisane wyżej metody ciągle mogą być stosowane w nomenklaturze ogólnej.

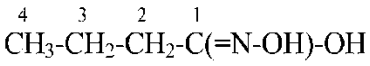
Przykłady:



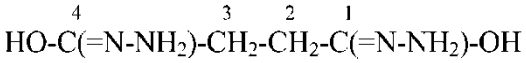
kwas *N*-hydroksyetanoimidowy (PIN)
kwas acetohydroksymowy



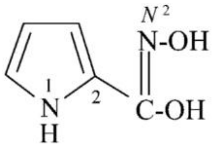
kwas *N*-hydroksybenzenokarboksyimidowy (PIN)
kwas benzohydroksymowy



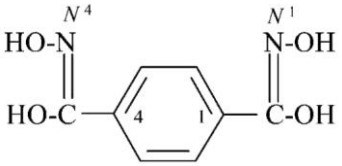
kwas *N*-hydroksybutanoimidowy (PIN)
kwas butyrohydroksymowy
kwas butanohydroksymowy



kwas N^1,N^4-dihydroksybutanodiimidowy (PIN)
kwas sukcynohydroksymowy
kwas butanodihydroksymowy



kwas N^2-hydroksy-1*H*-pirolo-2-karboksyimidowy (PIN)
kwas pirolo-2-karbohydroksymowy



kwas N^1,N^4-dihydroksybenzeno-1,4-dikarboksyimidowy (PIN)
kwas tereftalohydroksymowy

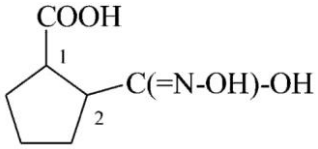
P-65.1.3.3.2 Nomenklatura podstawnikowa, metoda przedrostków

Jeśli obecna jest grupa starsza w wyborze grupy głównej, wówczas stosuje się następujące przedrostki:

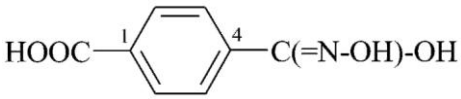
(1) '*C*,*N*-dihydroksykarbonoimidoil' określa grupę –C(=N-OH)-OH;

(2) kombinację przedrostków 'hydroksy' oraz 'hydroksyimino' przed nazwą łańcucha węglowego stosuje się w nazwach preferowanych IUPAC, nie zaleca się stosowania przedrostka 'dihydroksykarbonoimidoil'

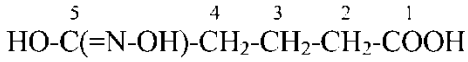
Przykłady:



(1) kwas 2-(*C*,*N*-dihydroksykarbonoimidoilo)cyklopentano-1-karboksylowy (PIN)



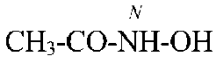
(1) kwas 4-(*C*,*N*-dihydroksykarbonoimidoilo)benzoesowy (PIN)



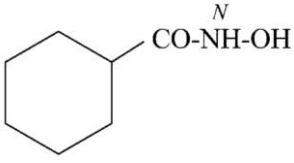
(2) kwas 5-hydroksy-5-(hydroksyimino)pentanowy (PIN)
(1) kwas 4-(*C*,*N*-dihydroksykarbonoimidoilo)butanowy

P-65.1.3.4 Kwasy hydroksyamowe o ogólnej strukturze R-CO-NH-OH nazywa się jako *N*-hydroksy amidy (patrz P-66.1.1.3.2). Stosowanie przyrostków :'hydroksyamowy' oraz 'karbohydroksyamowy' w nazwach kwasów nie jest już zalecane dla nazw preferowanych IUPAC, ale ciągle jest kontynuowane w nomenklaturze ogólnej.

Przykłady:



N-hydroksyacetamid (PIN)
kwas acetohydroksyamowy



N-hydroksycykloheksanokarboksyamid (PIN)
kwas cykloheksanokarbohydroksyamowy

P-65.1.4 Kwasy peroksykarboksylowe

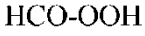
Ogólna metodologia modyfikowania kwasów wyrażanych przyrostkami według nomenklatury zamiennej funkcji polega na zastosowaniu zmodyfikowanych przyrostków analogicznie jak nie modyfikowanych. Główną zmianą i uproszczeniem jest zalecenie że przyrostki modyfikuje się wrostkami.

P-65.1.4.1 Kwasy peroksykarboksylowe nazywa się systematycznie stosując następujące przyrostki:

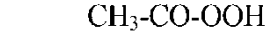
-(C)O-OOH kwas peroksowy
-CO-OOH kwas karboperoksowy

Zachowane nazwy kwasów karboksylowych modyfikuje się przedrostkiem ‘peroksy’. Preferowane nazwy IUPAC tych kwasów tworzy się według metodologii zamiany funkcji w systematycznych nazwach kwasów karboksylowych.

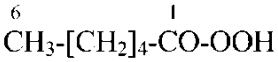
Przykłady:



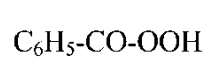
kwas metanoperoksowy (PIN)
kwas peroksymrówkowy
kwas permrówkowy



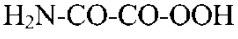
kwas etanoperoksowy (PIN)
kwas peroksyoctowy
kwas peroctowy



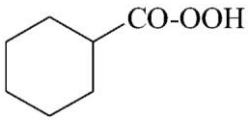
kwas heksanoperoksowy (PIN)



kwas benzenokarboperoksowy (PIN)
kwas peroksybenzoesowy
kwas perbenzoesowy



kwas amino(okso)etanoperoksowy (PIN)
kwas peroksyoksamowy



kwas cykloheksanokarboperoksowy (PIN)

kwas etanodiperoksowy (PIN)
kwas diperoksyszczawiowy

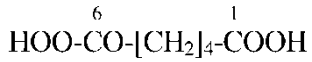
P-65.1.4.2 Jeśli obecna jest inna grupa o wyższym priorytecie wskazywania przyrostkiem (patrz starszeństwo klas, P-41), stosuje się następujące przedrostki:

(1) prosty przedrostek zamienny funkcji ‘karbonoperoksoil’ lub zespolony przedrostek ‘hydroperoksykarbonyl’ utworzony w wyniku powiązania w oparciu o prostą grupę acylową ‘karbonyl’ –C=O (patrz P-65.2.1.5), używany jest do nazwania grupy acylowej –C(O)-OOH

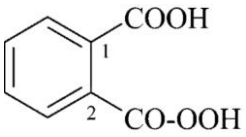
jako podstawnik; przedrostek ‘karbonoperoksoil’ używany jest w preferowanym nazewnictwie IUPAC, za wyjątkiem przypadku przedstawionego poniżej w punkcie (2);

(2) połączenie prostych przedrostków ‘hydroperoksy’ i ‘okso’ przed nazwą macierzystego wodorku zaleca się w preferowanym nazewnictwie IUPAC; natomiast przedrostki ‘hydroperoksykarbonyl’ i ‘karbonoperoksoil’ nie są już tak zalecane.

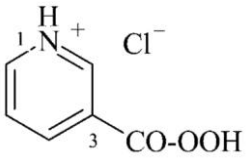
Przykłady:



(2) kwas 6-hydroperoksy-6-oksoheksanowy (PIN)
(1) kwas 5-karbonoperoksoilopentanowy
kwas 5-(hydroperoksykarbonylo)pentanowy



(1) kwas 2-karbonoperoksoilobenzoesowy (PIN)
(2) kwas 2-hydroperoksykarbonylo)benzoesowy
kwas monoperoksyftalowy (patrz P-65.1.4.1)

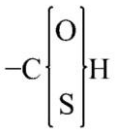


(1) chlorek 3-karbonoperoksoilopirydyn-1-ium (PIN)
chlorek 3-(hydroperoksykarbonylo)pirydyn-1-ium

P-65.1.5 Analogi chalkogenowe kwasów karboksylowych

P-65.1.5.1 Zamiana funkcji w nazwach systematycznych kwasów karboksylowych

Zamianę atom(u)ów tlenu grupy karboksylowej na inny chalkogen wskazuje się wrostkami ‘tio’, ‘seleno’ lub ‘telluro’. Nazwy te nie różnicują form tautomerycznych kwasów posiadających dwa różne atomy chalkogenu; przedstawienie takich struktur bez sprecyzowania położenia poszczególnych atomów chalkogenów może być zaprezentowane na dwa sposoby jak poniżej:

 lub –C{O/S}H

W nazwach tautomeryczne grupy w mieszanych kwasach chalkogenokarboksylowych, takie jak –CO-SH, CS-OH lub S(O)-SH, S(S)-OH rozróżnia się poprzedzając słowo ‘kwas’ pisanym kursywą symbolem pierwiastka np. *O* lub *S*, na przykład –(C)O-SH zapisujemy jako *S*-kwas tiowy, CS-OH jako *O*-kwas karbotiowy. Przeważnie lokanty te pomija się, ze względu na nieznane lub nieistotne położenie atomów w kwasach chalogenokarboksylowych, natomiast lokanty literowe stosuje się w nomenklaturze estrów.

Jeśli pozycje atomów chalkogenu nie są określone, stosuje się przedrostek dla niezmodyfikowanego kwasu np.: ‘karboksy’ w przypadku grupy –COOH i modyfikuje się go zgodnie z zamianą funkcji, otrzymując przedrostek ‘tiokarboksy’ dla grupy –C{O/S}H, z atomami

chalkogenów w nawiasie aby uniknąć możliwej dwuznaczności. Porządek starszeństwa tych przyrostków jest szczegółowo opisany w P-43.

Jeśli pozycje chalkogenów są znane, to w związkach acyklicznych stosuje się połączenie przedrostków takich jak ‘hydroksy’ z ‘sulfanylideno’ lub ‘sulfanylo’ z ‘okso’; przedrostki zespolone takie jak ‘[hydroksy(karbonotioil)]-‘ oraz ‘(sulfanylokarbonyl)-‘ stosuje się w nazwach związków cyklicznych (patrz P-64.2.1.6). Przedrostki zespolone tworzy się w wyniku powiązania używając proste przedrostki acylowe pochodzące od kwasu karbonowego (patrz P-65.2.1.5).

Porządek starszeństwa między kwasami i kwasami modyfikowanymi zamianą funkcji jest omówiony w P-43 i podsumowany w Tabeli 4.3. W obecności niemodyfikowanych kwasów wskazywanych przyrostkami kwasy modyfikowane wskazuje się przedrostkami.

Przykłady:

CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-CS-OH
O-kwas heksanotiowy (PIN)

CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-C{S/Se}H
kwas heksanoselenotiowy (PIN)

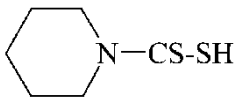
CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-CSe-SH
S-kwas heksanoselenotiowy (PIN)

H{S,O}C-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-C{O/S}H
kwas heksanobis(tiowy) (PIN)

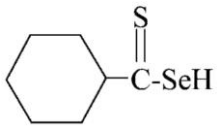
HSSC-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-CS-SH
kwas heksanobis(ditiowy) (PIN)

CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-C{O/Se}H
kwas heksanoselenowy (PIN)

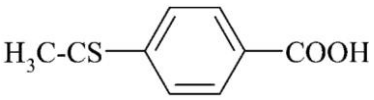
H{S/O}C-CH_2-CH_2-C{O/S}H
kwas butanobis(tiowy) (PIN)



kwas piperydyno-1-karboditiowy (PIN)



Se-kwas cykloheksanokarboselenotiowy (PIN)



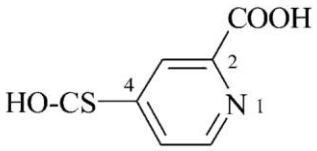
kwas 4-(etanotioilo)benzoesowy (PIN)
kwas 4-(tioacetylo)benzoesowy

5 4 3 2 1
H{S/O}C-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-COOH
kwas 5-(tiokarboksy)pentanowy (PIN)

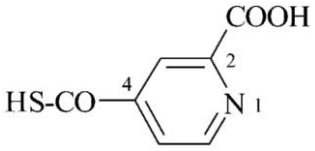
4 3 2 1
HS-CO-CH_2-CH_2-COOH
kwas 4-okso-4-sulfanylobutanowy (PIN)
kwas 3-(sulfanylokarbonylo)propanowy

HO-C(=S)-CH_2-CH_2-COOH
kwas 4-hydroksy-4-sulfanylidenobutanowy (PIN)

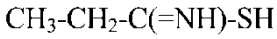
HS-C(=O)-COOH
kwas (okso)sulfanylo octowy (PIN)



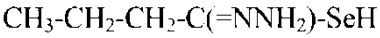
kwas 4-(hydroksykarbonotioilo)pirydyno-2-karboksylowy (PIN)



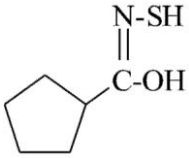
kwas 4-(sulfanylokarbonylo)pirydyno-2-karboksylowy (PIN)



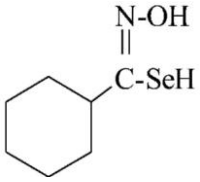
kwas propanoimidotiowy (PIN)



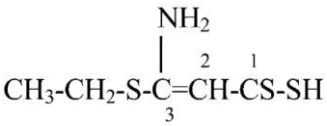
kwas butanohydrazonoselenowy (PIN)



kwas *N*-sulfanylocyklopentanokarboksyimidowy (PIN)



kwas *N*-hydroksycykloheksanokarboksyimidoselenowy (PIN)



kwas 3-amino-3-(etylosulfanylo)prop-2-eno(ditiowy) (PIN)

P-65.1.5.2 Zamiana funkcji w zachowanych nazwach kwasów karboksylowych

Preferowane nazwy chalkogenowych analogów kwasów monokarboksylowych tworzy się stosując przyrostek ‘kwas tiowy’, ‘kwas selenowy’, ‘kwas tellurowy’ lub ‘kwas karbotiowy’, ‘kwas karboselenowy’, ‘kwas karbotellurowy’ wraz z nazwą odpowiedniego macierzystego wodorku, nawet w przypadku kwasu mrówkowego, octowego i benzoesowego.

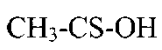
Stosowanie systematycznych nazw podstawnikowych dla chalkogenowych analogów kwasów monokarboksylowych jest zmianą w przypadku kwasów mrówkowego, octowego, benzoesowego, szczawiowego i oksamowego.

Chalkogenowe analogi kwasów monokarboksylowych mających zachowane nazwy można też nazywać umieszczając przedrostek ‘tio’, ‘seleno’ lub ‘telluro’ przed nazwą kwasu.

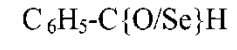
Chalkogenowe analogi kwasów dikarboksylowych nazywa się systematycznie; do tworzenia nazw nie używa się nazw zachowanych.

Symbole *O, S, Se* oraz *Te* stosuje się w celu sprecyzowania struktury kwasu, jak opisano w P-65.1.5.1.

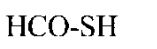
Przykłady:



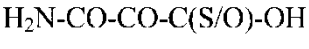
O-kwas etanotiowy (PIN)
O-kwas tiooctowy



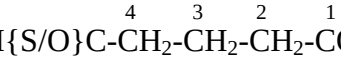
kwas benzenokarboselenowy (PIN)
kwas selenobenzoesowy



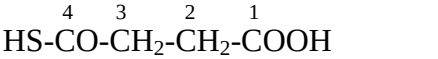
S-kwas metanotiowy (PIN)
S-kwas tiomrówkowy



(*O*,*S*)-kwas 3-amino-2,3-dioksopropanotiowy (PIN)



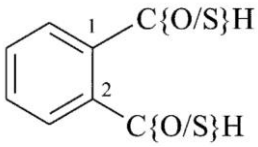
kwas 4-(tiokarboksy)butanowy (PIN)
(nie kwas tioglutarowy)



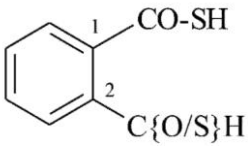
kwas 4-okso-4-sulfanylobutanowy (PIN)
(nie kwas tiobursztynowy)

kwas (tiokarboksy)mrówkowy (PIN)
(patrz P-65.1.8.2)

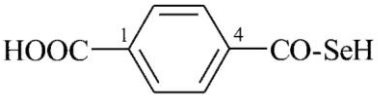
kwas hydroksylo(sulfanylideno)octowy (PIN)



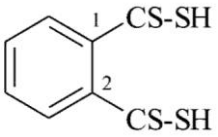
kwas benzeno-1,2-dikarbotiowy (PIN)
(nie kwas 1,2-ditioftalowy)



S-kwas 2-(tiokarboksy)benzeno-1-karbotiowy (PIN)
(nie *S*-kwas 1,2-ditioftalowy)



kwas 4-(selanylokarbonylo)benzoesowy (PIN)
(nie *Se*-kwas 1-selenoftalowy)



kwas benzeno-1,2-dikarboditiowy (PIN)
(nie kwas tetratioftalowy)

HS-CS-CS-SH kwas etanobis(ditiowy) (PIN)
(nie kwas tetratioszczawiowy)

P-65.1.5.3 Zamiana funkcji w kwasach peroksykarboksylowych

Przyrostki peroksykwasów mogą być modyfikowane przez S, Se i Te nomenklaturą zamienną funkcji. Pisane kursywą przedrostki przed słowem ‘kwas’ stosuje się w celu sprecyzowania struktury, jeśli jest to wymagane. (patrz Tabela 4.3 więcej przykładów przyrostków modyfikowanych zgodnie z regułami zamiany funkcji oraz ich porządek starszeństwa). Preferowane nazwy tworzy się stosując odpowiednie przyrostki wraz z nazwą macierzystego wodorku, nawet w przypadku pochodnych kwasów mrówkowego, octowego i benzoesowego.

Stosowanie systematycznych nazw podstawnikowych dla chalkogenowych analogów kwasów peroksykarboksylowych jest zmianą w przypadku kwasów mrówkowego, octowego, benzoesowego, szczawiowego i oksamowego.

Przykłady:

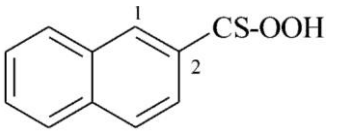
-(C)O-OSH	*OS*-kwas (tioperoksowy) (preferowany przyrostek)
-(C)Se-SSH	kwas (ditioperokso)selenowy (preferowany przyrostek)
-CO-SOH	*SO*-kwas karbo(tioperoksowy) (preferowany przyrostek)
-CS-OOH	kwas karboperoksotiowy (preferowany przyrostek)
-COSSH	kwas ditiokarboperoksowy (preferowany przyrostek; położenie atomu siarki nieznane)

Zalecane przyrostki i ich porządek starszeństwa są szczegółowo wyjaśnione w P-43.

Przykłady:

CH_3-CO-OSH C_6H_5-CO-SOH

OS-kwas etano(tioperoksowy) (PIN) *SO*-kwas benzenokarbo(tioperoksowy) (PIN)
(nie *OS*-kwas peroksytiooctowy) (nie *SO*-kwas peroksotiobenzoesowy)



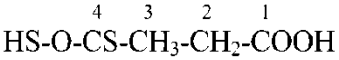
kwas naftaleno-2-karboperoksotiowy (PIN)
(nie kwas peroksytio-2-naftoesowy)

Przedrostki zespolone takie jak ‘sulfanyloksy’ i ‘okso’ oraz ‘hydroksysulfanyl’ i ‘sulfanylideno’służą do tworzenia preferowanych nazw IUPAC.

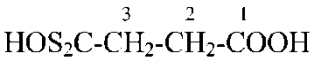
Odpowiednie przedrostki konstruowane metodą powiązania w oparciu o proste grupy acylowe wywodzące się z kwasu węglowego i jego pochodnych (patrz P-65.2.1.5) również prowadzą do preferowanych nazw IUPAC. Lokanty literowe takie jak: ‘*OS*’ i ‘*SO*’są wymagane do określenia struktur grup tioperoksylowych (patrz P-63.4.2.2).

Tworzenie przedrostków nomenklatury zamiennej funkcji posiada pewne ograniczenia, związane z brakiem, jak dotąd, sposobu na jednoznaczne opisanie precyzyjnej struktury grupy tioperoksylowej.

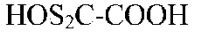
Przykłady:



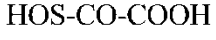
kwas 4-sulfanylideno-4-(sulfanyloksy)butanowy (PIN)
kwas 3-[(*SO*-tiohydroperoksy)karbonotioilo]propanowy (zob. P-63.4.2.2)
(nie kwas 3-karbono(tioperokso)tioilopropanowy niejednoznaczna nazwa)



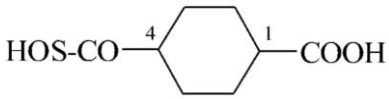
kwas 3-(ditiokarbonoperoksoilo)propanowy (PIN)
(nieznane położenie atomów siarki)



kwas (ditiokarbonoperoksoilo)mrówkowy (PIN)
(nieznane położenie atomów siarki)



kwas (hydroksysulfanylo)oksooctowy (PIN)



kwas 4-[(hydroksysulfanylo)karbonylo]cykloheksanokarboksylowy (PIN)
kwas 4-[(*OS*-tiohydroperoksy)karbonylo]cykloheksano-1-karboksylowy

P-65.1.6 Kwasy amowe, anilowe, aldehydowe

Kwasy amowe są związkami zawierającymi grupę zarówno karboksylową –COOH jak i karboksyamidową $–CONH_2$; podobnie jest w przypadku kwasów anilowego i aldehydowego, które posiadają grupę karboksylową oraz karboksyanilidową $–CO-NH-C_6H_5$ w pierwszym przypadku i grupę formylową –CHO, w drugim. Końcówki w nazwach kwasów ‘amowy’, ‘anilowy’ i ‘aldehydowy’ stosowane są jedynie w nomenklaturze ogólnej, aby nazywać zmodyfikowane kwasy

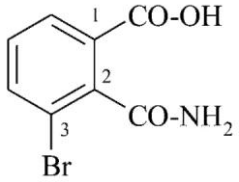
dikarboksylowe mające nazwy zachowane. Preferowane nazwy IUPAC tworzy się systematycznie stosując preferowane nazwy kwasów oraz odpowiednie przedrostki.

P-65.1.6.1 Kwasy amowe

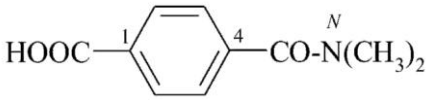
Jeśli kwasy dikarboksylowe posiadają nazwę zachowaną (patrz P-65.1.1) i jeśli jedną z grup karboksylowych zastąpiono grupą karboksyamidową –CO-NH_2, to taką strukturę nazywa się kwasem amowym i w nomenklaturze ogólnej nazywa się go zastępując końcówkę ‘owy’ w nazwie kwasu dikarboksylowego końcówką ‘amowy’. Przypadek kwasu szczawiowego jest szczególny; podstawienie jest niemożliwe dla kwasu, ale możliwe w przypadku pochodnego kwasu amowego, - kwasu oksamowego, lokanty *N* w nazwie nie są wymagane. Nazwa ‘kwas oksamowy’ (kontrakcja kwasu oksaloamowego) jest nazwą zachowaną NH_2-CO-COOH i jest to preferowana nazwa IUPAC.

Przedrostek ‘karbamoil’ zastąpił przedrostek ‘aminokarbonyl’ w nazewnictwie systematycznym kwasów amowych. Połączenie przedrostków ‘amino’ z ‘okso’ stosuje się do opisu grupy –CO-NH_2 na końcu łańcucha acyklicznego w preferowanych nazwach IUPAC.

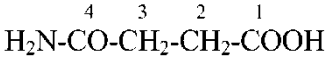
Przykłady:



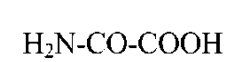
kwas 3-bromo-2-karbamoilobenzoesowy
kwas 2-(aminokarbonylo)-3-bromobenzoesowy



kwas 4-(dimetylokarbamoilo)benzoesowy (PIN)
kwas 4-[(dimetyloamino)karbonylo]- benzoesowy
kwas *N*,*N*-dimetylotereftalamowy



kwas 4-amino-4-oksobutanowy (PIN)
kwas 3-karbamoilopropanowy
kwas 3-(aminokarbonylo)propanowy
kwas sukcynoamowy



kwas oksamowy (PIN; nazwa zachowana)
(nie kwas oksaloamowy

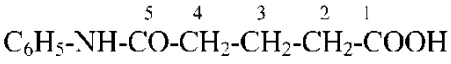
P-65.1.6.2 Kwasy anilowe

N-fenylowe pochodne kwasów amowych nazywamy ‘kwasami anilowymi’ i w nomenklaturze ogólnej nazywa się je zamieniając końcówkę ‘amowy’ na ‘anilowy’. Podstawienie atomu azotu wskazuje się lokantem *N*, również w przypadku, gdy podstawienie jest niedozwolone w

macierzystym kwasie. Kwasy anilowe mogą być również nazywane jako *N*-podstawione kwasy amowe. Lokantami podstawników pierścienia *N*-fenylowego są numery primowane.

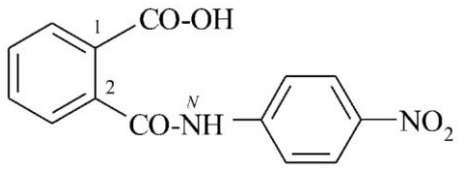
Połączenie przedrostków ‘anilino’ i ‘okso’ do opisu grupy –CO-NH-C_6H_5 stosuje się przed nazwą acyklicznego łańcucha węglowego w preferowanych nazwach IUPAC.

Przykłady:



kwas 5-anilino-5-oksopentanowy (PIN)
kwas 5-okso-5-(fenyloamino)pentanowy
kwas 4-(fenylokarbamoilo)butanowy
kwas *N*-fenyloglutaroamowy
kwas glutaroanilowy

kwas anilino(okso)octowy (PIN)
kwas oksaloanilowy

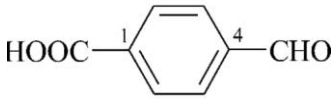


kwas 2-[(4-nitrofenylo)karbamoilo]benzoesowy
kwas *N*-(4-nitrofenylo)ftalamowy
kwas 4′-nitroftalanilowy

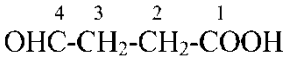
P-65.1.6.3 Kwasy aldehydowe

Jeśli kwas dikarboksylowy ma zachowaną nazwę (zob. P-65.1.1) i jedną z grup karboksylowych zastąpimy grupą formylową –CHO (zob. P-65.1.7.2.1), to powstałą strukturę nazywamy kwasem aldehydowym. W nomenklaturze ogólnej nazwę tworzy się zastępując końcówkę ‘owy’ w nazwie kwasu dikarboksylowego końcówką ‘aldehydowy’. Preferowane nazwy IUPAC kwasów aldehydowych wywodzących się od kwasów dikarboksylowych to nazwy systematyczne. W preferowanych nazwach IUPAC stosuje się przedrostek ‘formylo’, z wyjątkiem związków, gdy grupa –CHO znajduje się na końcu acyklicznego łańcucha, kiedy stosuje się przedrostek ‘okso’.

Przykłady:



kwas 4-formylobenzoesowy (PIN)
kwas tereftaloaldehydowy



kwas 4-oksobutanowy (PIN)
kwas 3-formylopropanowy
kwas sukcynoaldehydowy

kwas oksooctowy (PIN)
kwas oksaloaldehydowy
(nie kwas glioksalowy)

P-65.1.7 Grupy acylowe wywodzące się z kwasów karboksylowych i ich analogów

P-65.1.7.1 Definicje i tworzenie nazw
P-65.1.7.2 Grupy acylowe pochodzące z kwasów karboksylowych mających nazwy zachowane, będące preferowanymi nazwami IUPAC (zob. P-65.1.1.1)
P-65.1.7.3 Grupy acylowe pochodzące od kwasów karboksylowych mających nazwy zachowane, używane tylko w nomenklaturze ogólnej (zob. P-65.1.1.2)
P-65.1.7.4 Grupy acylowe pochodzące od kwasów karboksylowych o nazwach systematycznych
P-65.1.7.5 Mieszane grupy acylowe

P-65.1.7.1 Definicje i tworzenie nazw

Grupami karboacylowymi są R-CO-, -OC-R-CO-, -OC-R-[R′-CO-]$_x$-R′′-CO- (gdzie x= 1,2 ,3 itd.) i ich analogi wynikające z zamiany funkcji, gdzie R, R′ i R′′ mogą być łańcuchami, pierścieniami lub układami pierścieni. Utworzone są one w wyniku usunięcia grupy hydroksylowej z grupy karboksylowej, co w nazwie wskazuje się przyrostkami.

Nazwy systematyczne grup karboacylowych i ich analogów zamiany funkcji opisane są w następnych podrozdziałach. Nazwy zespolonych podstawników acyklicznej grupy acylowej takie jak ‘1-oksopropylo’ i ‘1-iminoetylo’ dla, odpowiednio, CH_3CH_2-CO- i CH_3-C(=NH)- stosuje się w nomenklaturze ogólnej.

P-65.1.7.2 Grupy acylowe pochodzące od kwasów karboksylowych posiadających preferowane przez IUPAC nazwy zachowane, (patrz P-65.1.1.1), np. grupy karboacylowe.

Nazwy mono- i diwalencyjnych grup karboacylowych utworzonych w wyniku usunięcia grupy OH z każdego ugrupowania karboksylowego kwasów karboksylowych i ich analogów zamiany funkcji określanych przyrostkiem ‘owy’ pochodzą z nazw odpowiednich kwasów i tworzy się je przez zamianę końcówki ‘owy’ na ‘oil’ lub ‘yl’ z równoczesnym pominięciem słowa ‘kwas’.

Ogólna zasada, według której końcówki przedrostków wszystkich grup acylowych mają formę ‘oil’ zaproponowana wiele lat temu, nie była zawsze przestrzegana. Zasada ta jest w pełni realizowana w obecnych zaleceniach, poza pewnymi wyjątkami, które zachowały się przez wzgląd na tradycję.

Nazwy grup karboacylowych wywodzących się z kwasów nazywanych ‘kwas karboksylowy’ tworzy się zamieniając przyrostek ‘karboksylowy’ na ‘karbonyl’. Grupy acylowe pochodzące od analogów zamiany funkcji nazywa się zamieniając przyrostki: ‘karbotiowy’ na ‘karbotioil’ (i tak samo dla analogów selenowych czy tellurowych); kwas ‘karboksyimidowy’ na ‘karboksyimidoil’, kwas ‘karbohydrazonowy’ na ‘karbohydrazonoil’ lub kwas ‘karbohydroksymowy’ na ‘karbohydroksyimidoil’.

P-65.1.7.2.1 Grupy acylowe wywodzące się z kwasów karboksylowych określanych za pomocą nazw zachowanych preferowanych przez IUPAC (zob. P-65.1.1.1).

Przykłady:

CH_3-CO-	acetyl (preferowany przedrostek) etanoil 1-oksoetyl	HCO-	formyl (preferowany przedrostek) metanoil oksometyl

C_6H_5-CO- benzoil (preferowany przedrostek)
benzenokarbonyl
(okso)fenylometyl

-CO-CO-oksalil (preferowany przedrostek)
etanodioil
dioksoetano-1,2-diyl

HO-CO-CO- oksalo (preferowany przedrostek)
karboksykarbonyl
[nie karboksyformyl; nie hydroksy(okso)acetyl]

P-65.1.7.2.2 Grupy acylowe odpowiadające kwasom karboksyimidowym, karbohydrazonowym, karbohydroksymowym i karbohydroksyamowym opisanym w P-65.1.3.

Stosowanie utworzonych systematycznie nazw grup acylowych pochodzących od kwasów imidowego, hydrazonowego, hydroksymowego i hydroksyamowego jest zmianą dla kwasów mrówkowego, octowego, benzoesowego i szczawiowego.

Przykłady:

CH_3-C(=NH)- etanoimidoil (preferowany przedrostek)
acetoimidoil
1-iminoetyl

HC(=NH)- metanoimidoil (preferowany przedrostek)
formoimidoil
iminometyl

C_6H_5-C(=NH)- benzenokarboksyimidoil (preferowany przedrostek)
benzoimidoil
imino(fenylo)metyl

-C(=NH)-C(=NH)- etanodiimidoil (preferowany przedrostek)
oksaloimidoil
diiminoetano-1,2-diyl

HC(=NNH_2)- metanohydrazonoil (preferowany przedrostek)
formohydrazonoil
hydrazynylidenometyl

CH_3-C(=NNH2)- etanohydrazonoil (preferowany przedrostek)
acetohydrazonoil
1-hydrazynylidenoetyl

C_6H_5-C(=N-OH)- *N*-hydroksybenzenokarboksyimidoil (preferowany przedrostek)
N-hydroksybenzimidoil
benzenokarbohydroksymoil

P-65.1.7.2.3 Chalkogenowe analogi grup acylowych odpowiadających kwasom karboksylowym mającym zachowane nazwy będące preferowanymi nazwami IUPAC, nazywa się systematycznie stosując wrostki nomenklatury zamiennej funkcji; nazwy te są preferowanymi nazwami IUPAC.

Stosowanie nazw systematycznych dla grup acylowych pochodzących od chalkogenowych analogów kwasów karboksylowych stanowi zmianę w przypadku kwasów mrówkowego, octowego, benzoesowego i szczawiowego.

Przykłady:

CH_3-CSe- etanoselenoil (preferowany przedrostek)
selenoacetyl
1-selanylidenoetyl

HCS- metanotioil (preferowany przedrostek)
tioformyl
sulfanylidenometyl

C_6H_5-CS- benzenokarbotioil (preferowany przedrostek)
tiobenzoil
fenylo(sulfanylideno)metyl
fenylo(tiokso)metyl

-CS-CS- etanobis(tioil) (preferowany przedrostek)
ditiooksalil
bis(sulfanylideno)etano-1,2-diyl

P-65.1.7.2.4 Grupy acylowe i podstawniki pochodzące od kwasu szczawiowego

Przykłady:

OCH-CO-
oksoacetyl (od kwasu oksooctowego, P-65.1.6.3)
(preferowany przedrostek)
oksoaldehydoil

Cl-CO-CO-
chloro(okso)acetyl
(preferowany przedrostek)
chlorooksalil

HO-CO-CS-
karboksymetanotioil (preferowany przedrostek)

HO-CS-CO-
hydroksy(sulfanylideno)acetyl
(preferowany przedrostek)
(nie 2-tiooksalo; nie 2-hydroksy-2-tiooksalil)

HO-CS-CS-
hydroksy(sulfanylideno)etanotioil
(preferowany przedrostek)
hydroksybis(sulfanylideno)etyl
(nie: 1,2-ditiooksalo)

HS-CS-CS-
sulfanylo(sulfanylideno)etanotioil
(preferowany przedrostek)
2-sulfanylo-1,2-bis(sulfanylideno)etyl
tritiooksalo

HO-CO-CO-O-
oksalooksy (preferowany przedrostek)
(karboksykarbonylo)oksy

HO-CO-CO-NH-
oksaloamino (preferowany przedrostek)
(karboksykarbonylo)amino

HO-CO-CO-S-
oksalosulfanyl (preferowany przedrostek)
(karboksykarbonylo)sulfanyl

HO-CO-CS-S-
(karboksymetanotioilo)sulfanyl
(preferowany przedrostek)

P-65.1.7.3 Grupy acylowe pochodzące od kwasów karboksylowych posiadających nazwy zachowane tylko dla nomenklatury ogólnej (zob. P-65.1.1.2).

P-65.1.7.3.1 Zwyczajowe nazwy są zachowane dla grup acylowych wywodzących się z kwasów o nazwach zachowanych do stosowania tylko w nomenklaturze ogólnej (zob. P-65.4.3.2); podstawienie grup acylowych jest analogiczne jak kwasów. Zasada, że nazwa grupy acylowej ma końcówkę 'oil' w pewnych przypadkach dopuszcza końcówkę 'yl'. Nieliczne wyjątki od tych reguł przedstawiają przykłady poniżej. Preferowanymi nazwami IUPAC są systematyczne nazwy podstawnikowe.

Przykłady:

CH_3-CH_2-CH_2-CO- butyryl
butanoil (preferowany przedrostek)
1-oksobutyl

CH_3-CH_2-CO- propionyl
propanoil (preferowany przedrostek)
1-oksopropyl

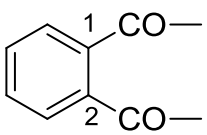
-OC-CH_2-CO- malonyl
propanodioil (preferowany przedrostek)
1,3-dioksopropano-1,3-diyl

-CO-CH_2-CH_2-CO sukcynyl
butanodioil (preferowany przedrostek)
1,4-dioksobutano-1,4-diyl

-OC-$[CH_2]_3$-CO- glutaryl
pentanodioil (preferowany przedrostek)
1,5-dioksopentano-1,5-diyl

CH_2=CH-CO- akryloil
prop-2-enoil (preferowany przedrostek)
1-oksoprop-2-en-1-yl

CH_2=C(CH_3)-CO- metakryloil
2-metyloprop-2-enoil (preferowany przedrostek)
2-metylo-1-oksoprop-2-en-1-yl



ftaloil
benzeno-1,2-dikarbonyl (preferowany przedrostek)
1,2-fenylenobis(oksometyleno)

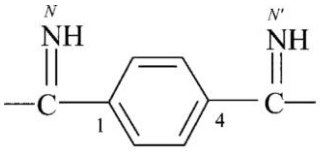
P-65.1.7.3.2 Nazwy grup acylowych pochodzących od kwasów imidowego, hydrazonowego, hydroksymowego o nazwach zachowanych stosowanych w nomenklaturze ogólnej tworzy się zamieniając w nazwach kwasów (opisanych w P-65.1.3) końcówkę ‘owy’ na ‘oil’ lub ‘yl’ z pominięciem słowa ‘kwas’.

Przykłady:

CH_3-CH_2-C(=NH)- propionoimidoil
propanoimidoil (preferowany przedrostek)
1-iminopropyl

CH_2=CH-C(=NNH_2)- akrylohydrazonoil
prop-2-enohydrazonoil (preferowany przedrostek)
1-hydrazynylidenoprop-2-en-1-yl

-(HN=)C-CH_2-CH_2-C(=NH)- sukcynoimidoil
butanodiimidoil (preferowany przedrostek)
1,4-diiminobutano-1,4-diyl



tereftaloimidoil
benzeno-1,4-dikarboksyimidoil (preferowany przedrostek)
1,4-fenylenobis(iminometyleno)

P-65.1.7.3.3 Chalkogenowe analogi grup acylowych pochodzących od kwasów o nazwach zachowanych, stosowanych w nomenklaturze ogólnej nazywa się za pomocą przedrostka określającego zamianę funkcji.

Nazwy grup acylowych pochodzących od kwasów monokarboksylowych modyfikuje się za pomocą przedrostków celem oznaczenia zamiany funkcji na =S, =Se lub =Te. Przedrostki grup acylowych pochodzących od kwasów dikarboksylowych nazywa się systematycznie, zgodnie z regułami opisanymi w P-65.1.7.4.

Przykłady:

CH_3-CH_2-CS– CH_2=CH-CSe–

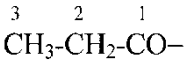
tiopropionyl selenoakryloil
propanotioil (preferowany przedrostek) prop-2-enoselenoil (preferowany przedrostek)
1-sulfanylidenopropyl 1-selenylidenoprop-2-en-1-yl

HS-CS-CS- sulfanylo(sulfanylideno)etanotioil (preferowany przedrostek)
2-sulfanylo-1,2-bis(sulfanylideno)etyl
tritiooksalo

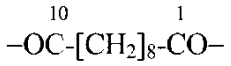
P-65.1.7.4 Grupy acylowe pochodzące od kwasów karboksylowych o nazwach utworzonych systematycznie

P-65.1.7.4.1 Nazwy mono- i diwalencyjnych grup acylowych utworzonych w wyniku usunięcia grupy OH z każdego ugrupowania karboksylowego kwasów karboksylowych określanych przyrostkiem ‘owy’ pochodzą z nazw odpowiednich kwasów i tworzy się je zamieniając końcówki ‘owy’ na ‘oil’ z równoczesnym pominięciem słowa ‘kwas’. Nazwy grup acylowych pochodzących od kwasów karboksylowych nazywanych według nomenklatury zamiennej funkcji, wszystkie mają końcówkę ‘oil’. Przedrostki takie jak ‘okso’, ‘imino’, ‘sulfanylideno’, ‘tiokso’, ‘hydrazynylideno’, itd. wraz z przedrostkiem określającym węglowodór mogą być użyte w nomenklaturze ogólnej.

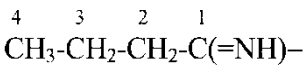
Przykłady:



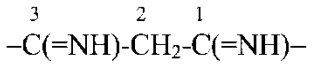
propanoil (preferowany przedrostek)
propionyl
1-oksopropyl



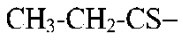
dekanodioil (preferowany przedrostek)
1,10-dioksodekanodiyl



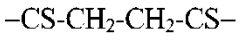
butanoimidoil (preferowany przedrostek)
butyroimidoil
1-iminobutyl



propanodiimidoil (preferowany przedrostek)
malonoimidoil
1,3-diiminopropano-1,3-diyl



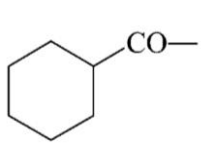
propanotioil (preferowany przedrostek)
tiopropionyl
1-sulfanylidenopropyl
1-tioksopropyl



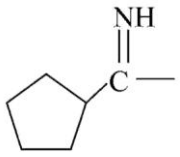
butanobis(tioil) (preferowany przedrostek)
1,4-bis(sulfanylideno)butano-1,4-diyl
1,4-ditioksobutano-1,4-diyl
(nie ditiosukcynyl)

P-65.1.7.4.2 Nazwy grup acylowych wywodzących się z kwasów określonych za pomocą przyrostka ‘karboksylowy’ tworzy się zamieniając przyrostek ‘karboksylowy’ na ‘karbonyl’. Analogicznie, przyrostek ‘karbotiowy’ zastępuje przyrostek ‘karbotioil’, ‘karboselenowy’ zastępowany jest przyrostkiem ‘karboselenoil’, dla przyrostka ‘karbotellurowy’ stosuje się zamianę na ‘karbotelluroil’; przyrostek ‘karboksyimidowy’ zastępowany jest przyrostkiem ‘karboksyimidoil’, a dla przyrostka ‘karbohydrazonowy’ stosuje się formę ‘karbohydrazonoil’.

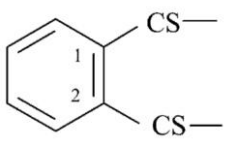
Przykłady:

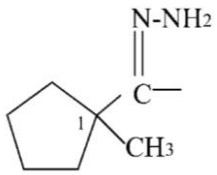


cykloheksanokarbonyl (preferowany przedrostek)
cykloheksylokarbonyl
cykloheksylo(okso)metyl



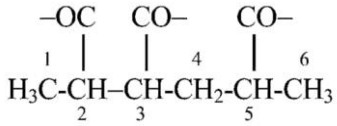
cyklopentanokarboksyimidoil (preferowany przedrostek)
cyklopentylokarbonoimidoil
cyklopentylo(imino)metyl



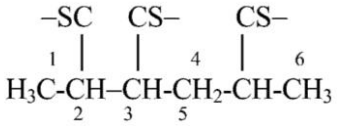


cykloheksano-1,2-dikarbotioil
(preferowany przedrostek)
(nie ditioftaloil)
1,2-fenylenobis(sulfanylidenometylen)
1,2-fenylenobis(tioksometylen)

1-metylocyklopentano-1-karbohydrazonoil
(preferowany przedrostek)
(1-metylocyklopentylo)(hydrazynylideno)metyl



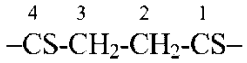
heksano-2,3,5-trikarbonyl (preferowany przedrostek)
heksano-2,3,5-triylotris(oksometylen)



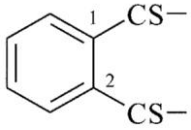
heksano-2,3,5-trikarbotioil (preferowany przedrostek)
heksano-2,3,5-triylotris(sulfanylidenometylen)
heksano-2,3,5-triylotris(tioksometylen)

P-65.1.7..4.3 Grupy acylowe pochodzące od kwasów dikarboksylowych określanych nazwami zachowanymi modyfikowanymi zamianą funkcji na grupę =S, -Se i =Te nazywa się systematycznie, jak opisano w P-65.1.7.4.2.

Przykłady:



butanobis(tioil) (preferowany przedrostek)
(nie ditiosukcynyl)
1,4-bis(sulfanylideno)butano-1,4-diyl

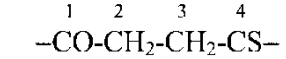


benzeno-1,2-dikarbotioil (preferowany przedrostek)
(nie ditioftaloil)
1,4-fenylenobis(sulfanylidenometyleno)
1,4-fenylenobis(tioksometyleno)

P-65.1.7.5 Mieszane grupy acylowe

Mieszane grupy acylowe typu –(C=X)-[CH_2]$_x$-(C=Y)- nazywa się przez podstawienie podstawników alkanodiylowych

Przykłady:



1-okso-4-sulfanylidenobutano-1,4-diyl (preferowany przedrostek)

$$-\overset{1}{C}(=NH)-\overset{2}{C}Sc-$$

1-imino-2-selanylidenoetano-1,2-diyl (preferowany przedrostek)

P-65.1.8 Kwas mrówkowy

Na potrzeby nomenklatury związków organicznych kwas mrówkowy uważa się za kwas monokarboksylowy (zob. P-65.1). Jego nazwa jest nazwą zachowaną, jest traktowany podobnie jak kwas octowy, może być odpowiednio przekształcony w sole, estry, bezwodniki i tworzy grupę acylową używaną jako podstawnik. Analogi zamiany funkcji nazywa się systematycznie, jak na przykład kwas metanotiowy lub kwas metanoimidowy. Atom wodoru związany z atomem węgla może być zastąpiony innym atomem wówczas nazwę struktury ustala się zgodnie z regułami opisanymi w P-65.1.8.1, P-65.1.8.2 i P-65.1.8.3.

P-65.1.8.1 Podstawienie atomu wodoru kwasu mrówkowego wymienionymi poniżej atomami lub grupami nie jest zalecane.

-OOH, -SH, -SeH, -TeH, -F, -Cl, -Br, -I, $-N_3$, -NC, -CN, -NCO, -NCS, -NCSe, -NCTe, $-NH_2$, $-NH-NH_2$

Nazwy takich struktur pochodzą od nazwy podstawionego kwasu karbonowego, dla którego stosuje się nomenklaturę zamienną funkcji (patrz P-65.2.1.4) i stanowią preferowane nazwy IUPAC a także są używane w nomenklaturze ogólnej.

> **Uwaga**: Podstawienie atomu wodoru w kwasie mrówkowym grupą $-NH-NH_2$ prowadzi do struktury, w nazwie której używa się przyrostka dla kwasu karboksylowego łączonego z macierzystym wodorkiem hydrazyną (zob. P-68.3.1.2). Przyrostek dla kwasu karboksylowego jest starszy w porządku starszeństwa klas od pochodnej kwasu karbonowego nazwanej za pomocą nomenklatury zamiennej funkcji (P-41).

Przykłady:

$H_2N-NH-COOH$ kwas hydrazynokarboksylowy (PIN)
kwas karbonohydrazynowy; zob P-65.2.1.4
(nie: kwas karbazowy)

Cl-COOH
kwas karbonochlorydowy (PIN)
(nie kwas chloromrówkowy)

HS-COOH
S-kwas karbonotiowy (PIN)
(nie kwas sulfanylomrówkowy)

P-65.1.8.2 Podstawienie atomu wodoru w kwasie mrówkowym jest dozwolone podstawnikami innymi niż te wymienione w P-65.1.8.1.

Przykład:

$O_2N-COOH$
kwas nitromrówkowy (PIN)

H(S/O)C-COOH
kwas (tiokarboksy)mrówkowy (PIN, patrz P-65.1.5.2)

P-65.1.8.3 Nazwy grup acylowych pochodzących od kwasu mrówkowego tworzy się według reguł omówionych w P-65.1.7.1, a nazwy przedrostków zespolonych konstruuje się w zależności od struktury podstawnika. Atom wodoru grupy formylowej –CHO jest podstawialny w takich samych warunkach jak opisane w P-65.1.8.2 dla kwasu mrówkowego.

Przykłady:

Cl-CO- karbonochlorydoil (preferowany przedrostek) (nie chloroformyl)	Br-CS- karbonobromidotioil (preferowany przedrostek) (nie bromo(tioformyl)]
HCO-O- formyloksy (preferowany przedrostek)	HCO-S- formylosulfanyl (preferowany przedrostek)

P-65.2 KWAS WĘGLOWY, CYJANOWY I KWASY DI- I POLIKARBONOWE

Kwas węglowy, cyjanowy i kwasy di- i polikarbonowe należą do grupy związków o macierzystych funkcjach różnych od kwasów karboksylowych; kwasy te nie posiadają w strukturze atom(u)ów wodoru, których obecność pozwalałaby na stosowanie nomenklatury podstawnikowej.

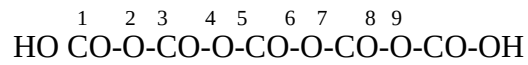
Zestawione poniżej kwasy sklasyfikowane jako mononuklearne kwasy węglowe mają nazwy zachowane będące preferowanymi nazwami IUPAC.

kwas karbonowy (PIN)	HO-CO-OH
kwas cyjanowy (PIN)	HO-CN

Wymienione poniżej di- i polinuklearne kwasy karbonowe mają nazwy zachowane, będące zarazem preferowanymi nazwami IUPAC.

kwas dikarbonowy (PIN)	HO-CO-O-CO-OH
kwas trikarbonowy (PIN)	HO-CO-O-CO-O-CO-OH
kwas tetrakarbonowy (PIN)	HO- CO-O-CO-O-CO-O-CO-OH
kwas polikarbonowy	HO-[CO-O]$_n$-H n=5,6 i wyższe homologi nazywane są wg nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu

Przykład:



kwas 2,4,6,8-tetraoksanonanodiowy (PIN)

Malejący porządek starszeństwa kwasów karbonowych jak przedstawiono w P-41 jest następujący:
kwasy polikarbonowe> kwas tetrakarbonowy> kwas trikarbonowy> kwas dikarbonowy> kwas karbonowy> kwas cyjanowy

P-65.2.1 Kwas karbonowy
P-65.2.2 Kwas cyjanowy
P-65.2.3 Kwasy di-, tri-, tetra- i polikarbonowe

P-65.2.1 Kwas karbonowy

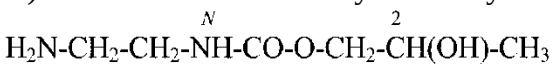
Nomenklatura chalkogenowych analogów i pochodnych kwasu karbonowego opiera się na zamianie funkcji jednego atomu tlenu w grupach -OH lub podwójnie związanego atomu tlenu =O i wskazuje się ją w nazwie wrostkami. Nie zaleca się tworzenia na podstawie tej reguły nazw podstawionego kwasu mrówkowego.

P-65.2.1.1 Skrócone nazwy: ‘kwas karbamowy’ (od kwasu karbonoamidowego) dla H_2N-CO-OH oraz ‘kwas karbamoimidowy’ (od kwasu karbonoamidoimidowego) dla H_2N-C(=NH)-OH, są nazwami zachowanymi preferowanymi przez IUPAC.

Przykłady:

kwas dimetylokarbamowy (PIN)

kwas *N*-etylo-*N*-metylokarbamoimidowy (PIN)



2-hydroksypropylo(2-aminoetylo)karbamian (PIN)

P-65.2.1.2 Zamiana funkcji w nazwach kwasu karbonowego i karbamowego na –OO-, -S-, -Se- i –Te- wyrażana jest wrostkami, odpowiednio: ‘perokso’, ‘tio’, ‘seleno’ i ‘telluro’. Grupy tautomeryczne w mieszanych kwasach chalkokarbonowych, takich jak OH-CO-SH lub HO-CS-OH rozróżnia się pisanymi kursywą symbolami pierwiastków ‘*S*’ lub ‘*O*’ przed słowem ‘kwas’; symbole ‘*OS*’ i ‘*SO*’ stosuje się w nazewnictwie peroksykwasów.

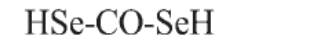
Przeciwnie do reguł P-65.1.3-P-65.1.5, nomenklatura zamienna funkcji stosowana jest z nazwą zachowaną ‘kwas karbamowy’ ale już nie z systematyczną nazwą: ‘kwas karbonoamidowy’.

Przykłady:

O-kwas karbamotiowy (PIN)

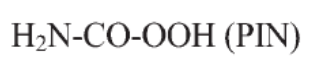
Se-kwas karbamoselenowy (PIN)

S-kwas karbonotiowy (PIN)
(nie kwas sulfanylomrówkowy)



Se,*Se*-kwas karbonodiselenowy (PIN)

kwas karbonotritiowy



kwas karbamoperoksowy

kwas karbonoperoksowy (PIN)

kwas karbonodiperoksowy (PIN)

OS-kwas karbono(tioperoksowy) (PIN)

OS,*SO*-kwas karbonobis(tioperoksowy) (PIN)

P-65.2.1.3 Zamiana funkcji =O w ‘kwasie karbonowym’ i ‘kwasie karbamowym’ na =NH i =N-NH_2 wyrażana jest w nazwie wrostkami ‘imido’ i ‘hydrazono’, natomiast zamiana tlenu w grupie OH kwasu na atomy chalkogenowe wyrażana jest w nazwie wrostkami szczegółowo opisanymi w P-65.2.1.2. Jak podano w P-65.2.1.1 ‘kwas karbamoimidowy’jest zachowaną nazwą H_2N-C(=NH)-OH (w miejsce nazwy systematycznej ‘kwas karbonoamidoimidowy’) i jest preferowaną nazwą IUPAC. Modyfikacja atomami chalkogenu wyrażana jest za pomocą nomenklatury zamiennej funkcji w sposób opisany dla ‘kwasu karbamowego’.

Lokanty literowe *N*, *N′*, itd. zapisane kursywą stosuje się do określenia podstawienia na atomie azotu.

Przykłady:

HO-C(=NH)-OH
kwas karbonoimidowy (PIN)

H_2N-C(=NH)-OH
kwas karbamoimidowy (PIN; nazwa zachowana)

HO-C(=N-NH_2)-OH
kwas karbonohydrazonowy (PIN)

HS-C(=NH)-OH
kwas karbonoimidotiowy (PIN)

H_2N-C(=NH)-SH
kwas karbamoimidotiowy (PIN)

HSe-C(=N-NH_2)-SeH
kwas karbonohydrazonodiselenowy (PIN)

H_2N-C(=NH)-OSH
OS-kwas karbamoimido(tioperoksowy) (PIN)

P-65.2.1.4 Zamiana funkcji jednej z grup –OH kwasu karbonowego różnymi atomami lub grupami wyrażana jest w nazwie następującymi wrostkami : ‘fluorydo’ dla –F, ‘chlorydo’ dla –Cl, ‘bromido’ dla –Br, ‘jodydo’ dla –I, ‘azydo’ dla -N_3, ‘cyjanido’ dla –CN, ‘izocyjanido’ dla –NC, ‘izocyjanianido’ dla –NCO, ‘izotiocyjanianido’ dla –NCS, ‘izoselenocyjanianido’ dla –NCSe lub ‘izotellurocyjanianido’ dla –NCTe (patrz P-67).

Lokanty literowe *N*, *N′* pisane kursywą stosuje dla wskazania podstawienia atomu azotu.

Zastąpienie grupą NH-NH_2 daje ‘kwas hydrazynokarboksylowy’ i stosuje się dla kwasu i jego pochodnych (patrz P-68.3.1.2).

Przykłady:

H_2N-CO-OH
kwas karbamowy (PIN, nazwa zachowana)
(nie kwas karbonoamidowy)

H_2N-C(=NH)-OH
kwas karbamoimidowy (PIN, nazwa zachowana)
(nie kwas karbonoamidoimidowy)

H_2N-CO-SH
S-kwas karbamotiowy (PIN)

H_2N-C(=NH)-SeH
kwas karbamoimidoselenowy (PIN)

Cl-CO-OH
kwas karbonochlorydowy (PIN)

NC-CO-OH
kwas karbonocyjanianowy (PIN)

N_3-CO-OH
kwas karbonoazydowy (PIN)

SCN-CO-OH
kwas karbonoizotiocyjanianowy (PIN)

H_2N-NH-CO-OH
kwas hydrazynokarboksylowy (PIN)

kwas karbonohydrazydowy (nazwy kwasów tworzone za pomocą przyrostków są preferowane względem analogów kwasu karbonowego(patrz P-41, P-68.3.1.2.1)

P-65.2.1.5 Grupy acylowe pochodzące od kwasu karbonowego i jego pochodnych

Grupy acylowe pochodzące od kwasu karbonowego i jego pochodnych, włączając analogi zamiany funkcji, powstałe w wyniku usunięcia jednej lub dwóch grup hydroksylowych z kwasu, nazywa się zgodnie z metodologią opisaną w P-65.1.7.2. Nazwy tworzy się na dwa sposoby:

(1) Nazwę można utworzyć poprzez zmianę końcówki ‘owy’ w nazwie kwasu na końcówki ‘yl’ lub ‘oil’. Nazwy grup acylowych z końcówką ‘yl’ stanowią wyjątek od zasad ogólnych (patrz P-65.1.7.2). Metoda ta jest metodą tradycyjną, stosowaną do ugrupowań, powstałych w wyniku usunięciu dwóch grup hydroksylowych z kwasu karbonowego lub jego analogów; obecnie jest to metoda zalecana zarówno, gdy jedna grupa hydroksylowa jest obecna w strukturze kwasu, jak i wówczas gdy diwalencyjne grupy acylowe takie jak ‘karbonyl’ mogą być wyrażone za pomocą przyrostka podstawnikowego typu ‘diyl’, w którym dwie wolne wiązalności nie muszą być równoważne (symbole CO< lub –CO-). Przedrostek podstawnikowy dla ugrupowania, w którym obie wolne wiązalności łączą się z tym samym atomem tworzy się zgodnie z zasadami nomenklatury podstawnikowej, na przykład: dla =CO formuje się nazwę ‘oksometyliden’ (zob. P-65.2.1.8).

(2) Nazwy tworzy się w operacji powiązania np.: dodając odpowiednie monowalencyjne podstawniki do diwalencyjnych grup acylowych takich jak :’karbonyl’, ‘karbonotioil’ i ‘karbonoimidoil’ utworzonych według sposobu (1).

Nazwy utworzone według metody (1) są preferowanymi nazwami IUPAC, i są preferowane względem innych nazw grup acylowych, co oznacza, że preferuje się stosowanie przedrostków a nie wrostków oraz tworzenie nazw w wyniku częściowego lub całkowitego powiązania.

Przykłady:

HO-CO-OH
kwas karbonowy (PIN)

–CO–
karbonyl (preferowany przedrostek)

HO-CS-OH
O,*O*-kwas karbonotiowy (PIN)

–CS–
karbonotioil (preferowany przedrostek)
tiokarbonyl

HO-C(=NH)-OH
kwas karbonoimidowy (PIN)

–C(=NH)–
karbonoimidoil (preferowany przedrostek)

HO-C(=NNH_2)-OH

–C(=N-NH_2)–

kwas karbonohydrazonowy (PIN) karbonohydrazonoil (preferowany przedrostek)

H_2N-CO-OH H_2N-CO–

kwas karbamowy (PIN) karbamoil (nazwa zachowana; preferowany przedrostek)
aminokarbonyl

H_2N-CS-OH H_2N-CS–

O-kwas karbamotiowy (PIN) karbamotioil (nazwa zachowana; preferowany przedrostek)
aminokarbonotioil

H_2N-C(=NH)-OH H_2N-C(=NH)–

kwas karbamoimidowy (PIN) karbamoimidoil (nazwa zachowana; preferowany przedrostek)
aminokarbonoimidoil

Cl-CO-OH Cl-CO–

kwas karbonochlorydowy (PIN) karbonochlorydoil (preferowany przedrostek)
chlorokarbonyl

NC-CO-OH NC-CO–

kwas karbonocyjanidowy (PIN) karbonocyjanidoil (preferowany przedrostek)
karbononitridoilokarbonyl
cyjanokarbonyl

Br-CS-OH Br-CS–

O-kwas karbonobromidotiowy (PIN) karbonobromidotioil (preferowany przedrostek)
bromokarbonotioil

Cl-C(=NH)-OH Cl-C(=NH)–

kwas karbonochlorydoimidowy (PIN) karbonochlorydoimidoil (preferowany przedrostek)
C-chlorokarbonoimidoil

HOO-CO-OH HOO-CO–

kwas karbonoperoksowy karbonoperoksoil (preferowany przedrostek)
(hydroperoksy)karbonyl

P-65.2.1.6 Przedrostek ‘karboksy’ i przedrostki dla chalkogenowych analogów

Przedrostek ‘karboksy’ dla grupy –COOH jest nazwą zachowaną. Nazwy chalkogenowych analogów tworzy się z wykorzystaniem reguł nomenklatury zamiennej funkcji, o ile nie jest konieczne precyzyjne określenie w nazwie położenia atomu chalkogenu. Atomy chalkogenu wskazują przedrostki zespolone, utworzone w wyniku powiązania.

Przykłady:

−COSH or −CSOH
tiokarboksy (preferowany przedrostek)

HS-CO–
sulfanylokarbonyl (preferowany przedrostek)

HS-CS–
ditiokarboksy (preferowany przedrostek)
sulfanylokarbonotioil

HO-CS–
hydroksykarbonotioil (preferowany przedrostek)

HOOC-O–
karboksyoksy (preferowany przedrostek)

HOOC-S–
karboksysulfanyl (preferowany przedrostek)

HOOC-NH–
karboksyamino
(preferowany przedrostek)

HS-CO-O–
sulfanylokarbonylo)oksy
(preferowany przedrostek)

P-65.2.1.7 Chalkogenowe analogi przedrostka ‘karbonoperoksoil’, –CO-OOH, można nazywać na trzy sposoby:

(1) używając wrostek gdy pozycja atomu chalkogenu nie jest znana;
(2) dodając przedrostek do nazwy związku;
(3) dodając przedrostki ‘tiohydroperoksy’ i, w zależności od struktury związku, pisane kursywą przedrostki *SO*- lub *OS*-.

Metody (1) lub (2) daje nazwy preferowane przez IUPAC.

Przykłady:

HOS-CSe – (2) (hydroksysulfanylo)karbonoselenoil (preferowany przedrostek)
(3) (*OS*-tiohydroperoksy)karbonoselenoil

HOS-CO- lub HSO-CO– (1) karbono(tioperoksoil) (preferowany przedrostek)
(3) (tiohydroperoksy)karbonyl

HS-O-CO-O– (2) [(sulfanyloksy)karbonyl]oksy (preferowany przedrostek)
(3) [(SO-tiohydroperoksy)karbonyl]oksy

HSS-CO-O– (2) (disulfanylokarbonyl)oksy (preferowany przedrostek)
(3) (ditiohydroperoksykarbonyl)oksy

P-65.2.1.8 Nazwy nieacylowych podstawników wywodzących się z kwasu karbonowego

Grupy acylowe wywodzące się z kwasu karbonowego lub kwasów karbonowych zmodyfikowanych przez zamianę funkcji to diwalencyjne grupy z dwiema wolnymi walencyjnościami typu ‘diyl’, takie jak (CO<). Gdy dwie wolne walencyjności są typu ‘ylidenowego’, np. =C=O, do określenia takich grup nie stosuje się nazw grup acylowych a używa się systematycznych nazw podstawnikowych.

Przykłady:

=C=O	oksometyliden (preferowany przedrostek)
=C=S	sulfanylidenometyliden (przedrostek preferowany) tioksometyliden
=C=NH	iminometyliden (przedrostek preferowany)
=C=N-NH_2	hydrazynylidenometyliden (przedrostek preferowany) diazanylidenometyliden

P-65.2.2 Kwas cyjanowy

Zachowuje się nazwę kwas cyjanowy dla NC-OH. Nazwa utworzona przez zamianę funkcji wywodząca się z kwasu karbonowego brzmiałaby kwas karbononitrydowy. Nazwa ta jednak nie jest stosowana i mimo, że systematyczna, jest zalecana tylko dla nomenklatury ogólnej. Kwas cyjanowy jest klasyfikowany jako kwas, z którego wywodzą się bezwodniki (patrz P-65.7.2) i estry (patrz P-65.6.3.2).

Zalecane przedrostki wywodzące się z kwasu cyjanowego to ‘cyjano’ dla –CN i ‘cyjaniano’ dla –O-CN, ‘tiocyjaniano’ dla –S-CN, ‘selenocyjaniano’ dla –Se-CN i ‘tellurocyjaniano’ dla –Te-CN. Zamianę funkcji przez –OO–, –S–, –Se– i –Te– wskazuje się odpowiednim przedrostkiem. Ten wyjątek w użyciu wrostków w nomenklaturze zamiany funkcji zastosowany do monojądrowych kwasów nieorganicznych (patrz P-67) jest konieczny dla zachowania dobrze utrwalonych nazw tradycyjnych i ich odpowiednich izocyjanianów, takich jak izotiocyjaniany. Dla uniknięcia możliwej dwuznaczności stosuje się nawiasy przy wprowadzaniu przedrostków chalkogenowych.

Przykłady:

NC-SH kwas tiocyjanowy (PIN) karbononitrydotiowy	NC-S– tiocyjano (przedrostek preferowany) karbononitrydoilosulfanyl karbononitrydoilotio
NC-OOH kwas peroksycyjanowy (PIN) kwas karbononitrydoperoksowy	NC-OO– cyjanoperoksy (przedrostek preferowany) karbononitrydoiloperoksy
NC-SS-H kwas ditioperoksycyjanowy (PIN) kwas karbononitrydo(ditioperoksowy)	NC-SS– cyjanodisulfanyl (przedrostek preferowany) karbononitrydoilodisulfanyl karbononitrydoiloditio
NC-CH_2-COOH kwas cyjanooctowy (PIN) kwas karbononitrydoilooctowy	NC-S-CH_2-CH_2-COOH kwas 3-(tiocyjano)propionowy (PIN) kwas 3-karbononitrydotioilopropanowy

P-65.2.3 Kwasy di-, tri-, tetra- i polikarbonowe

Kwasy di-, tri-, tetra- i polikarbonowe należą do serii kwasów homopolijądrowych, których centralnym atomem jest węgiel. Ich ogólny wzór to HO-[CO-O]$_n$-H, gdzie *n* to 2, 3, 4, itd., i nazywa się je dodając odpowiednie przedrostki odpowiadające liczbie atomów węgla do nazwy 'kwas karbonowy' lub pochodnej utworzonej przez zamianę funkcji. Struktura numerowana jest kolejno z jednego końca do drugiego, zaczynając od i kończąc na atomie węgla.

Przykłady:

^{1} ^{2} ^{3}
HO-CO-O-CO-OH kwas dikarbonowy (PIN)

^{1} ^{2} ^{3} ^{4} ^{5}
HO-CO-O-CO-O-CO-OH kwas trikarbonowy (PIN)

P-65.2.3.1 Zamiana funkcji dla di-, tri-, tetra- i polijądrowych kwasów karbonowych

P-65.2.3.1.1 Ogólna metodologia
P-65.2.3.1.2 Zastąpienie przez –OO–, –S–, =S, –Se–, =Se, –Te–,=Te, –NH–, =NH i =NHNH$_2$
P-65.2.3.1.3 Zastąpienie przez halogenki i pseudohalogenki
P-65.2.3.1.4 Zastąpienie przez grupy –NH$_2$ i –NHNH$_2$
P-65.2.3.1.5 Podstawniki wywodzące się z kwasów di-, tri-, tetra-, i polikarbonowych

P-65.2.3.1.1 Ogólna metodologia

Nomenklatura funkcyjnych analogów kwasów di-, tri-, tetra-, i polikarbonowych jest zgodna z zasadami stosowanymi w nazewnictwie polinuklearnych nieorganicznych okso kwasów (patrz P-67). Przedrostków używa się dla wskazania zamiany funkcji, a łańcuch numerowany jest kolejno z jednego końca do drugiego, zaczynając od i kończąc na atomie węgla. Przedrostki wymienione są w Tabeli 4.2; są one wymieniane w porządku alfabetycznym przed zachowanymi nazwami polikwasów, wraz z odpowiednimi lokantami, jeśli jest to wymagane.

P-65.2.3.1.2 Wymiana na –OO–, –S–, =S, –Se–, =Se, –Te–,=Te, –NH–, =NH i =NHNH$_2$

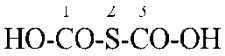
Funkcyjną zamianę atomu(ów) tlenu, -OH, =O, –OO– wskazuje się przedrostkami, i.e., peroksy dla –OO–; tio dla –S– lub =S; seleno dla –Se– lub =Se; telluro dla –Te– lub =Te; imido dla –NH– lub =NH i hydrazono dla =NHNH$_2$. Pozycja każdego zamienionego atomu tlenu wskazują odpowiednie lokanty numeryczne.

P-65.2.3.1.2.1 Aby określić podstawienie na atomach azotu, które nie należą do wiązania peptydowego będącego częścią łańcucha, dla którego stosuje się liczby arabskie jako lokanty, przy pisanym kursywą lokancie literowym podaje się lokanty w górnym indeksie, np. N^2, N^3.

To jest zmiana. Dotychczas, dla atomów azotu, które nie należą do wiązania peptydowego będącego częścią łańcucha, dla którego jako lokanty stosuje się

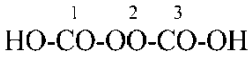
liczby arabskie, do tego celu używane były lokanty primowane , N′, N″, N‴, itd.

Przykłady:

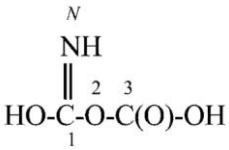


kwas 2-tiodikarbonowy (PIN)

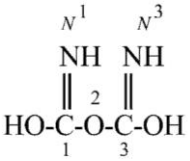
kwas 2-imidodikarbonowy (PIN)



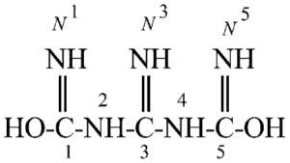
kwas 2-peroksydiwęglowy (PIN)



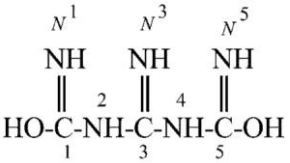
kwas 1-imidodikarbonowy (PIN)



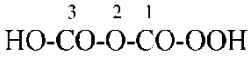
kwas 1,3-diimidodikarbonowy (PIN)



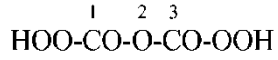
kwas 1,2,3,4,5-pentaimidotrikarbonowy (PIN)



kwas 1,2,3,4,5,6,7-heptaimidotetrakarbonowy (PIN)



kwas 1-peroksydikarbonowy (PIN)

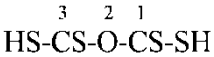


kwas 1,3-diperoksydikarbonowy (PIN)

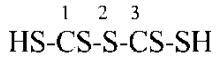
P-65.2.3.1.2.2 W razie potrzeby, aby wskazać pozycję atomu chalkogenu zastępującego tlen w grupach –OH lub =O używa się odpowiednich lokantów literowych *O*, *S*, *Se*, i *Te*. Gdy jest to potrzebne, przed słowem ‘kwas’ umieszcza się lokanty literowe z indeksem górnym, takie jak O^x, S^x, Se^x, Te^x.

Użycie lokantów literowych z górnymi indeksami jest zmianą w stosunku do poprzedniej praktyki, kiedy lokanty liczbowe umieszczano przed lokantami liczbowymi, tak jak 1-*O* i 3-*O* , co opisano w odn.1, reguła C-213.1

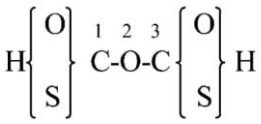
Przykłady:



kwas 1,1,3,3-tetratiodikarbonowy (PIN)



kwas pentatiodikarbonowy (PIN)



lub

$$H\{S/O\}\overset{1}{C}\text{-}\overset{2}{O}\text{-}\overset{3}{C}\{O/S\}H$$

kwas 1,3-ditiodikarbonowy (PIN; położenie atomów siarki jest nieznane)

$$HO\text{-}\overset{1}{C}S\text{-}\overset{2}{O}\text{-}\overset{3}{C}S\text{-}OH \qquad HS\text{-}\overset{1}{C}O\text{-}\overset{2}{O}\text{-}\overset{3}{C}O\text{-}SH$$

S^1,S^3-kwas 1,3-ditiodikarbonowy O^1,O^3-kwas- 1,3-ditiodikarbonowy (PIN)

P-65.2.3.1.2.3 Do nazywania analogów chalkogenowych o nieznanym położeniu atomów chalkogenu można używać zespolonych podstawników.

Przykłady:

H{S/O}C-O-CO-SH *S*-kwas [(tiokarboksy)oksy]metanotiowy (PIN)
H{S/O}C-O-CS-OH *O*-kwas [(tiokarboksy)oksy]metanotiowy (PIN)

P-65.2.3.1.3 Zamiana na halogenki i pseudohalogenki

Dla wskazania zamiany funkcji stosuje się przedrostki bromo dla –Br, chloro dla –Cl, fluoro dla –F, jodo dla –I, azydo dla $–N_3$,izocyjano dla –NC i izocyjaniano dla –NCO (i analogów chalkogenowych).

Przykłady:

$$Cl\text{-}\overset{1}{C}O\text{-}\overset{2}{O}\text{-}\overset{3}{C}O\text{-}OH \qquad OCN\text{-}\overset{1}{C}O\text{-}\overset{2}{N}H\text{-}\overset{3}{C}O\text{-}OH$$

kwas chlorodikarbonowy (PIN) kwas 1-izocyjaniano-2-imidodikarbonowy
(użyto lokantów dla uniknięcia niejednoznaczności)

P-65.2.3.1.4 Zamiana na grupy NH_2 i $NHNH_2$

Dla wskazania zamiany funkcji na grupy NH_2 i $NHNH_2$ używa się przedrostków, odpowiednio, amido i hydrazydo. Pisanych kursywą lokantów *N*, *N′*, itd. używa się do wskazania podstawienia na atomach azotu, które nie są częścią wiązania amidowego, dla których z kolei używa się lokantów numerycznych.

Przykłady:

$$H_2\overset{N}{N}\text{-}\overset{1}{C}O\text{-}\overset{2}{S}\text{-}\overset{3}{C}O\text{-}OH \qquad H_2\overset{N'}{N}\text{-}\overset{N}{N}H\text{-}\overset{1}{C}O\text{-}\overset{2}{N}H\text{-}\overset{3}{C}O\text{-}\overset{4}{N}H\text{-}\overset{5}{C}O\text{-}OH$$

kwas 1-amido-2-tiodikarbonowy (PIN) kwas 1-hydrazydo-2,4-diimidotrikarbonowy (PIN)

P-65.2.3.1.5 Podstawniki wywodzące się z kwasów di-, tri-, tetra- i polikarbonowych

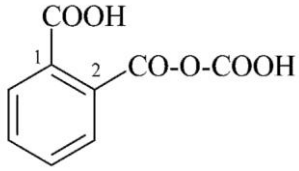
Nazwy podstawników tworzy się przez podstawienie lub powiązanie.

Przykłady:

HOOC-O-CO- HS-CS-S-CS-

(karboksyoksy)karbonyl
(preferowany przedrostek)
[nie (karboksyoksy)formyl]

[(ditiokarboksy)sulfanylo]karbonotioil
(przedrostek preferowany)
[(sulfanylokarbonotioilo)sulfanylo]karbonotioil
[sulfanylo(tiokarbonylo)sulfanylo](tiokarbonyl)
{nie [(ditiokarboksy)sulfanylo]tioformyl}



kwas 2-[(karboksyoksy)karbonylo]benzoesowy (PIN)

P-65.3 KWASY SIARKI, SELENU I TELLURU MAJĄCE ATOMY CHALKOGENÓW PRZYŁĄCZONE BEZPOŚREDNIO DO MACIERZYSTEGO WODORKU

P-65.3.0 Wprowadzenie. W tej sekcji omówione są następujące kwasy:

$R\text{-}SO_3H$	kwas sulfonowy	$R\text{-}SO_2H$	kwas sulfinowy
$R\text{-}SeO_3H$	kwas selenonowy	$R\text{-}SeO_2H$	kwas seleninowy
$R\text{-}TeO_3H$	kwas telluronowy	$R\text{-}TeO_2H$	kwas tellurynowy

Tabela 6.2 Przedrostki i przyrostki używane do tworzenia nazw kwasów siarki, selenu i telluru, z atomami chalkogenów bezpośrednio związanymi z macierzystą strukturą

grupa	preferowany przyrostek	preferowany przedrostek
$–SO_2\text{-}OH$	kwas sulfonowy	sulfo
–SO-OH	kwas sulfinowy	sulfino
$–SeO_2\text{-}OH$	kwas selenonowy	selenono
–SeO-OH	kwas seleninowy	selenino
$–TeO_2\text{-}OH$	kwas telluronowy	tellurono
–TeO-OH	kwas tellurynowy	telluryno

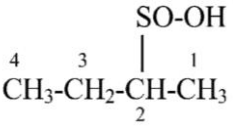
P-65.3.1 Nomenklatura podstawnikowa, stosowanie przyrostków dla kwasów sulfonowych, sulfinowych, itp.

Kwasy sulfonowe, sulfinowe etc. nazywa się podstawnikowo dodając do nazwy macierzystego wodorku odpowiedni przyrostek wymieniony w Tabeli 6.2. Dla określenia wielokrotności przyrostków

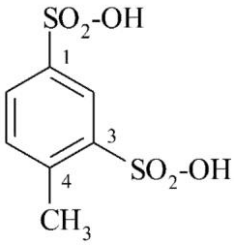
używa się przedrostków zwielokrotniających ‘di’, ‘tri’, ‘tetra’, itd. Nie zachowuje się nazwy ‘kwas sulfanilowy.’

Przykłady:

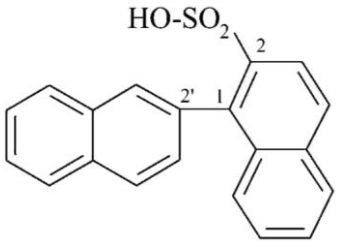
kwas benzenosulfonowy (PIN)



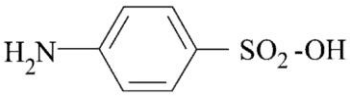
kwas butano-2-sulfinowy (PIN)



kwas 4-metylobenzeno-1,3-disulfonowy (PIN)
(nie kwas tolueno-2,4-disulfonowy)



kwas [1,2′-binaftaleno]-2sulfonowy (PIN)



kwas 4-aminobenzeno-1-sulfonowy (PIN)
(nie ‘kwas sulfanilowy’; ta nazwa nie została zachowana)

P-65.3.1.1 Modyfikacja przez zamianę funkcji

Atomy tlenu kwasu określonego przyrostkiem mogą być zastąpione nomenklaturą zamienną funkcji na -OO- i/lub inne analogi chalkogenowe, -S- lub =S, -Se- lub =Se, -Te- lub =Te, =NH, i =N-NH_2. Ogólne postępowanie polega na modyfikacji przyrostków przez wrostek i użycie ich w systematycznej nomenklaturze podstawnikowej w sposób określony dla niemodyfikowanych przyrostków. Jeśli jest to konieczne, nazwy tworzy się w zgodności z szeregiem starszeństwa, niezmodyfikowane kwasy, a następnie –OO– > S > Se > Te. Starszeństwo jest w pełni omówione w P-43.

P-65.3.1.2 Peroksy kwasy

Przyrostki podane w Tabeli 6.2 mogą być modyfikowane wrostkiem ‘perokso’ i użyte w nomenklaturze podstawnikowej, tak jak to pokazano w następujących przyrostkach.

-SO_2-OOH
kwas sulfonoperoksowy
(preferowany przyrostek)

-SeO-OOH
kwas seleninoperoksowy
(preferowany przyrostek)

Przykłady:

CH_3-SO_2-OOH
kwas metanosulfonoperoksowy (PIN)

C_6H_5-TeO-OOH
kwas benzenotellurynoperoksowy (PIN)

P-65.3.1.3 Modyfikacja innymi atomami chalkogenów

Przyrostki mogą być modyfikowane wrostkami ‘tio’, dla –S- lub =S, ‘seleno’ dla –Se- lub =Se, i ‘telluro’, dla –Te- lub =Te i tak użyte. Tautomery oznaczane są symbolami *S, Se* i *Te* umieszczonymi przed słowem ‘kwas’, aby pokazać pozycję atomu chalkogenu, gdy ta jest znana. Wrostki ‘tioperokso’, ‘selenoperokso’, itd. są używane dla wskazania zamiany funkcji w peroksy kwasach.

$-SO_2-SH$
S-kwas sulfonotiowy
(preferowany przyrostek)

$-Se(=S)-OH$
O-kwas seleninotiowy
(preferowany przyrostek)

$-SO_2-OSH$
OS-kwas sulfono(tioperoksowy)
(preferowany przyrostek)

$-TeO-SeSH$
SeS-kwas telluryno(selenotioperoksowy)
(preferowany przyrostek)

Przykłady:

$CH_3-CH_2-CH_2-S\{O,Se\}H$ kwas propano-1-sulfonoselenonowy (PIN)

$CH_3-CH_2-S(O)(S)-OH$
O-kwas etanosulfonotiowy (PIN)

$CH_3-CH_2-Se(=S)-OH$
O-kwas etanoseleninotiowy (PIN)

P-65.3.1.4 Kwasy imidowe i hydrazonowe wywodzące się z kwasów sulfonowych, sulfinowych, itp.

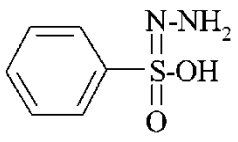
Kwasy imidowe i hydrazonowe wywodzące się z kwasów sulfonowych, sulfinowych, itp., nazywa się używając przyrostki takie jak ‘kwas sulfonoimidowy’ dla $-S(O)(=NH)-OH$ czy kwas sulfonohydrazynowy dla $-S(O)(=NNH_2)-OH$. Przedrostek ‘di’ wskazuje zamianę dwóch atomów tlenu (=O) w kwasach sulfonowych, na przykład, ‘kwas sulfonodiimidowy’ dla $-S(=NH)_2-OH$. Przyrostki wymienione są w Tabeli 4.3.

Przykłady:

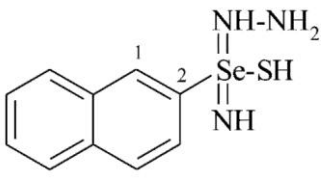
$CH_3-CH_2-S(=NH)_2-OH$ kwas etanosulfonodiimidowy (PIN)

$CH_3-S(=NH)-OH$
kwas metanosulfinoimidowy (PIN)

$C_6H_5-Se(=NH)_2-OH$
kwas benzenoselenonodiimidowy (PIN)



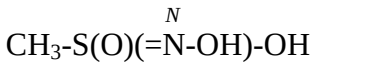
kwas benzenosulfonohydrazonowy (PIN)



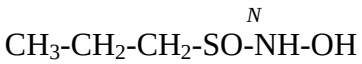
kwas naftaleno-2-selenonohydrazonoimidotiowy (PIN)

P-65.3.1.5 Kwasy hydroksymowe i kwasy hydroksamowe wywodzące się z kwasów sulfonowych, sulfinowych, itp. nazywa się odpowiednio jako kwasy *N*-hydroksysulfonoimidowe , *N*-hydroksysulfonoamidowe, itp. (patrz P-66.1.1.2).

Przykłady:



kwas *N*-hydroksymetanosulfonoimidowy (PIN)

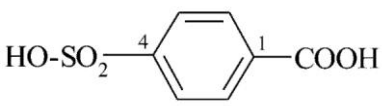


N-hydroksypropano-1-sulfinoamid (PIN)

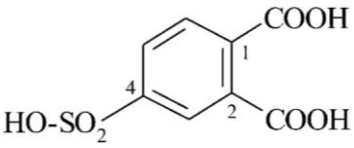
P-65.3.2 Nomenklatura podstawnikowa, stosowanie przedrostków dla kwasów sulfonowych, sulfinowych, itp.

P-65.3.2.1 Gdy obecna jest również inna, starsza grupa, która ma pierwszeństwo jako grupa główna (patrz P-41, P-42, P-43) lub gdy nie wszystkie grupy mogą być wskazane przyrostkami, to organiczne oksokwasy siarki, selenu lub telluru nazywa się dodając do nazwy macierzystego związku odpowiedni przedrostek podany w Tabeli 6.2. Te przedrostki mogą być modyfikowane przez przedrostki określające atomy chalkogenów w nomenklaturze zamiany funkcji w przypadku gdy pozycja atomu chalkogenu nie jest znana lub gdy nie jest pożądane jej wskazanie.

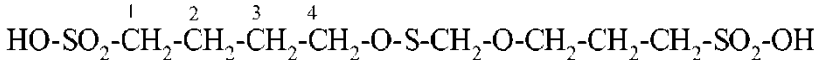
Przykłady:



kwas 4-sulfobenzoesowy

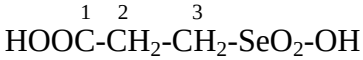


kwas 4-sulfobenzeno-1,2-dikarboksylowy (PIN)
kwas 4-sulfoftalowy

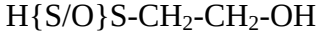


kwas 4-({[(3-sulfopropoksy)metylo]sulfanylo}oksy)butano-1-sulfonowy (PIN)

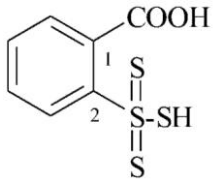
kwas sulfinooctowy (PIN)



kwas 3-selenonopropanowy



kwas 2-(tiosulfino)etano-1-sulfonowy (PIN)



kwas 2-tritiosulfobenzoesowy (PIN)
kwas 2-(sulfanylosulfonoditioilo)benzoesowy

P-65.3.2.2 Grupy acylowe wywodzące się z kwasów sulfonowych, sulfinowych, itp. i ich analogi utworzone w wyniku operacji zamiany funkcji

P-65.3.2.2.1 Acylowe grupy sulfonowe, sulfinowe, selenonowe, seleninowe, telluronowe i tellurynowe, R-EO_x–, –O_xE-R-EO_x–, –O_xE-R-[R′-EO_x–]-R′′-EO_x–, gdzie E = S, Se lub Te, x = 1 lub 2 a R, R′, R′′ są łańcuchami, pierścieniami lub układami pierścieni; ich analogi powstałe w wyniku operacji zamiany funkcji to grupy powstałe przez usunięcie grupy hydroksylowej z sulfonowej, sulfinowej lub odpowiedniej selenowej lub tellurowej grupy kwasowej, z których każda jest główną grupą charakterystyczną wskazywaną odpowiednim przyrostkiem

P-65.3.2.2.2 Nazwy grup acylowych utworzonych z kwasów sulfonowych i sulfinowych oraz ich Se i Te odpowiedników przez usunięcie grupy –OH z sulfonowego, sulfinowego, itp. kwasu wskazywanego przyrostkiem tworzy się zamieniając końcówkę przyrostka kwas ‘owy’ na ‘yl’. Gdy przyrostek jest zmodyfikowany zamianą funkcji, końcówka odpowiedniej grupy acylowej zmienia się na ‘oil’. Grupy acylowe utworzone przez powiązanie, na przykład, fenylosulfonyl, mogą być używane w nomenklaturze ogólnej

Istotną zmianą mającą na celu uproszczenie nazw jest tworzenie prostych przyrostków acylowych bezpośrednio z nazwy kwasu sulfonowego, kwasu sulfinowego itd. takich jak ‘benzenosulfonyl’, zamiast tradycyjnej metody powiązania, jak ‘fenylosulfonyl’. Aby ułatwić interpretację nazwy, preferowane przyrostki bierze się w nawias, mimo że są one prostymi przyrostkami.

Przykłady:

C_6H_5-SO_2-
benzenosulfonyl (przedrostek preferowany)
fenylosulfonyl

CH_3-SeO-
metanoseleninyl (przedrostek preferowany)
metyloseleninyl

CH_3-CH_2S(O)(S) –
etanosulfonotioil (przedrostek preferowany)
etylosulfonotioil

C_6H_5-S(Se) –
benzenosulfinoselenoil (przedrostek preferowany)
fenylosulfinoselenoil

CH_3-CH_2S(=NH) – etanosulfinoimidoil (przedrostek preferowany)
S-etylosulfinoimidoil

P-65.3.2.3 Podstawniki tworzone przez powiązanie

Gdy nazwa grupy acylowej nie może być utworzona bezpośrednio z przyrostkowej nazwy kwasu to stosuje się procedurę powiązania. W tej procedurze używa się nazw diwalencyjnych mononuklearnych grup acylowych. Grupy acylowe odpowiadające kwasowi siarkowemu (VI) i siarkowemu (IV) i odpowiednim kwasom selenowym i tellurowym tworzy się z tych kwasów przez odjęcie wszystkich grup –OH od kwasu macierzystego. W nomenklaturze związków organicznych używa się następujących nazw:

$–SO_2–$	sulfonyl (preferowany przedrostek) sulfuryl	–SO–	sulfinyl (preferowany przedrostek) tionyl
$–SeO_2–$	selenonyl (preferowany przedrostek)	–SeO–	seleninyl (preferowany przedrostek)
$–TeO_2–$	telluronyl (preferowany przedrostek)	–TeO–	tellurynyl (preferowany przedrostek)

Te grupy acylowe są modyfikowane wrostkami w nomenklaturze zamiany funkcji aby wskazać zastąpienie przez '=S', ' =Se', ' =Te', '=NH', i '=N-NH_2'.

Przykłady:

–S(=O)(=S)–	sulfonotioil (przedrostek preferowany)
–S(=S)(=S)–	sulfonoditioil (przedrostek zalecany)
–S(=NH)–	sulfinoimidoil (przedrostek preferowany)
$–Se(=O)(=NNH_2)–$	selenonohydrazonoil (przedrostek preferowany)
–Se(=S)(=NH)–	selenonoimidotioil (przedrostek preferowany)

Do nazw tych diwalencyjnych grup acylowych mogą być następnie dodawane przedrostki określające grupy charakterystyczne. Może być również użyty przedrostek 'hydro' dla H. Ta tradycyjna metoda daje preferowane nazwy IUPAC. Nazwy grup acylowych wywodzące się bezpośrednio z nazw kwasu siarkowego (VI) i kwasu siarkowego (IV) i ich Se i Te odpowiedników są niewłaściwe z powodu niejednoznaczności i niekompletności (patrz P-67.1.4.4.1). Zachowuje się nazwę sulfoamoil dla $H_2N-SO_2–$ jako preferowaną nazwę IUPAC.

Przykłady:

$CH_3O-SO_2–$

metoksysulfonyl (preferowany przedrostek)

Cl-S(O) –

chlorosulfinyl (preferowany przedrostek)

H_2N-SO_2-

sulfamoil (preferowany przedrostek)
aminosulfonyl
sulfuroamidoil

H-SO-

hydrosulfinyl (preferowany przedrostek)

$CH_3-CO-O-SO_2-$

(acetyloksy)sulfonyl (preferowany przedrostek)

$CH_3-O-S(=NH)-$

S-metoksysulfininoimidoil (preferowany przedrostek)

$HO-SO_2-O-$

sulfooksy (preferowany przedrostek)

$H-SeO_2-$

hydroselenonyl (preferowany przedrostek)

$-S-SO_2-S-$

sulfonylobis(sulfanodiyl) (preferowany przedrostek)

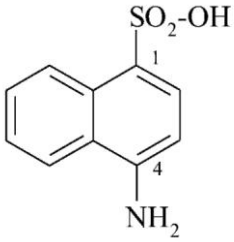
-O-SO-O-

sulfinylobis(oksy) (preferowany przedrostek)

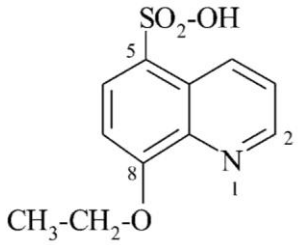
P-65.3.3 Związki polifunkcyjne

Związki polifunkcyjne nazywa się zgodnie z ogólnym szeregiem starszeństwa przyrostków opisanym w P-41 i P-43. Numeracja jest oparta o szereg starszeństwa opisany w P-61.1.

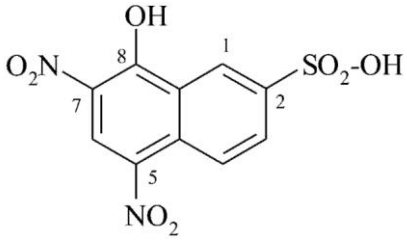
Przykłady:



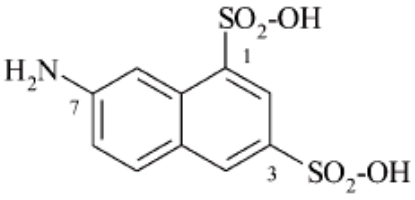
kwas 4-aminonaftaleno-1-sulfonowy (PIN)



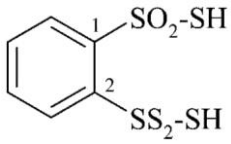
kwas 8-etoksychinolino-5-sulfonowy (PIN)



kwas 8-hydroky-5,7-dinitronaftaleno-2-sulfonowy (PIN)



kwas 7-aminonaftaleno-1,3-disulfonowy (PIN)

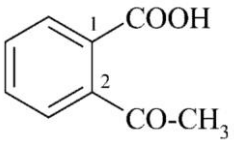


S-kwas 2-(tritiosulfo)benzeno-1-sulfonotiowy (PIN)

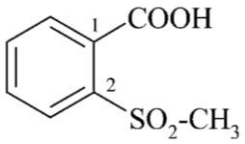
P-65.4 Grupy acylowe jako podstawniki

P-65.4.1 Nazw grup acylowych opisanych poprzednio używa się w tym samym brzmieniu aby nazwać podstawnik. Tak więc zachowany zostaje tradycyjny sposób wykorzystania grup acylowych wywodzących się z acyklicznych kwasów karboksylowych do nazywania ketonów, pseudoketonów i heteronów (więcej przykładów - patrz P-65.1.7).

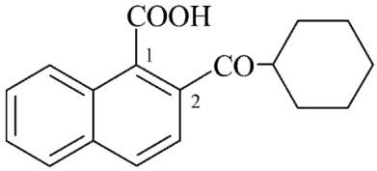
Przykłady:



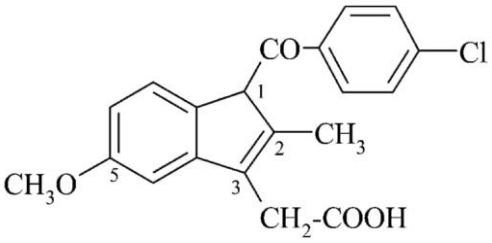
kwas 2-acetylobenzoesowy (PIN)



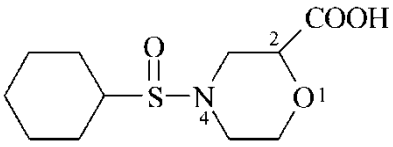
kwas 2-(metanosulfonylo)benzoesowy (PIN)
kwas 2-(metylosulfonylo)benzoesowy



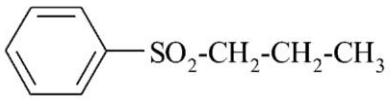
kwas 2-(cykloheksanokarbonylo)naftaleno-1-karboksylowy (PIN)
kwas 2-(cykloheksylokarbonylo)naftaleno-1-karboksylowy



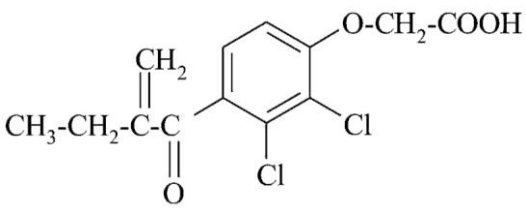
kwas [1-(4-chlorobenzoilo)-5-metoksy-2-metylo-1*H*-inden-3-ylo]octowy (PIN)



kwas 4-(cykloheksanosulfinylo)morfolino-2-karboksylowy (PIN)
kwas 4-(cykloheksylosulfinylo)morfolino-2-karboksylowy



(propano-1-sulfonylo)benzen (PIN)



kwas [2,3-dichloro-4-(2-metylidenobutanoilo)fenoksy]octowy (PIN)

P-65.5 HALOGENKI I PSEUDOHALOGENKI ACYLOWE

P-65.5.1 Halogenki acylowe wywodzące się z kwasów przyrostkowych
P-65.5.2 Pseudohalogenki acylowe wywodzące się z kwasów przyrostkowych
P-65.5.3 Halogenki i pseudohalogenki acylowe wywodzące się z kwasów karbonowego, cyjanowego i kwasów polikarbonowych
P-65.5.4 Halogenki i pseudohalogenki acylowe jako podstawniki

P-65.5.1 Halogenki acylowe wywodzące się z kwasów przyrostkowych

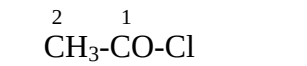
P-65.5.1.1 Halogenki kwasowe, w których grupy hydroksylowe wszystkich grup kwasowych określonych przyrostkiem wskazującym główną grupę charakterystyczną (kwasy karboksylowe, sulfonowe, sulfinowe selenonowe, itd.) zostały zastąpione przez atomy halogenków (F, Cl, Br i I) nazywa się wymieniając nazwę grupy acylowej (patrz P-65.1.7) poprzedzoną nazwą (ami) konkretnej (ych) klasy (klas), jako oddzielne słowo, w porządku alfabetycznym, każda, gdy zachodzi potrzeba, poprzedzona przedrostkiem zwielokrotniającym,.

Tabela 6.3 Klasy halogenków i pseudohalogenków acylowych

Halogenek		**Przedrostek**		**Pseudohalogenki**	**Przedrostek**
–F	fluorek	fluoro		$–N_3$ azydek	azydo
–Cl	chlorek	chloro		–CN cyjanek	cyjano
–Br	bromek	bromo		–NC izocyjanek	izocyjano
–I	jodek	jodo	–NCO izocyjanian	izocyjaniano	
			–NCS izotiocyjanian	izotiocyjaniano	
			–NCSe izoselenocyjanian	izoselenocyjaniano	
			–NCTe izotellurocyjanian	izotellurocyjaniano	

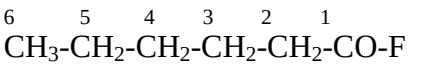
Zachowuje się nazwy formyl, acetyl, benzoil, oksalil i oksamoil jako preferowane przedrostki.

Przykłady:

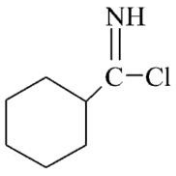


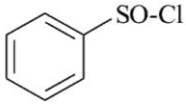
chlorek acetylu (PIN)

bromek formylu (PIN)

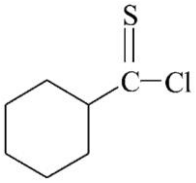


fluorek heksanoilu (PIN)



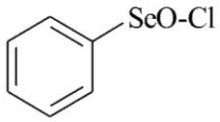


chlorek cykloheksanokarboimidoilu (PIN)



chlorek cykloheksanokarbonotioilu (PIN)

chlorek benzenosulfinylu (PIN)



chlorek benzenoseleninylu (PIN)

Cl-CO-CH_2-CO-Cl

dichlorek propanodioilu (PIN)
dichlorek malonylu

Cl-CO-CO-Cl

dichlorek oksalilu (PIN)
dichlorek etanodioilu

dichlorek benzeno-1,4-dikarbonylu (PIN)
dichlorek tereftaloilu

Br-O_2S-CH_2-CH_2-SO_2-Br

dibromek etano-1,2-disulfonylu (PIN)

Br-CO-CH_2-CH_2-CO-Cl

bromek chlorek butanodioilu (PIN)
bromek chlorek sukcynoilu

H_2N-CO-CO-Br

bromek oksamoilu (PIN)

P-65.5.2 Pseudohalogenki acylowe wywodzące się z przyrostkowych kwasów

P-65.5.2.1 Pseudohalogenki acylowe, w których grupy hydroksylowe wszystkich grup kwasowych określonych przyrostkiem wskazującym główną grupę charakterystyczną (kwasy karboksylowe, sulfonowe, sulfinowe selenonowe, itd.) zostały zastąpione przez grupy pseudohalogenkowe (N_3, CN, NC, NCO, NCS, NCSe, NCTe) nazywa się poprzedzając nazwę grupy acylowej (patrz P-65.1.7) nazwą (nazwami) konkretnej klasy jako oddzielnych słów, w porządku alfabetycznym, w razie potrzeby poprzedzonych przedrostkami zwielokrotniającymi. Gdy należy dokonać wyboru, starszą grupę pseudohalogenkową wybiera się zgodnie z malejącym szeregiem starszeństwa: N_3 > CN > NC > NCO > NCS > NCSe > NCTe. Atomy halogenków są starsze niż grupy pseudohalogenkowe.

Przy tworzeniu preferowanych nazw IUPAC zachowuje się nazwy formyl, acetyl, benzoil, oksalil i oksamoil.

Przykłady:

$^{4}H_3C$-$^{3}CH_2$-$^{2}CH_2$-^{1}CO-CN

cyjanek butanoilu (PIN)
cyjanek butyrylu

SCN-CO-CO-NCS

diizotiocyjanian oksalilu (PIN)

^{1}CN-^{2}CO-$^{3}CH_2$-$^{4}CH_2$-CO-NCS izocyjanek-izotiocyjanidan butanodioilu (PIN)

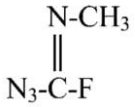
P-65.5.3 Halogenki i pseudohalogenki acylowe wywodzące się z kwasów karbonowego, cyjanowego i kwasów polikarbonowych

P-65.5.3.1 Grup acylowych wywodzących się z kwasu karbonowego, kwasu karbamowego i podobnych kwasów, takich jak ‘karbonyl’ z kwasu karbonowego, ‘karbamoil’ z kwasu karbamowego i ‘karbamoimidoi’ z kwasu karbamoimidowego używa się do tworzenia nazw odpowiednich halogenków acylowych.

Przykłady:

Cl-CO-Cl
dichlorek karbonylu (PIN)

Br-CO-Cl
bromek-chlorek karbonylu (PIN)
(nie chlorek karbonobromidowy)


fluorek *N*-metylokarbonoazydoimidoilu (PIN)

NC-CO-Cl
chlorek karbonocyjanidoilu (PIN)

H_2N-CO-NCO
izocyjanian karbamoilu (PIN)

P-65.5.3.2 Z uwagi na to,że nie ma grup acylowych wywodzących się z kwasów di- i polikarbonowych, nazwy kalogenków acylowych, pochodnych tych kwasów, tworzy się wymieniajac nazwę kwasu poprzedzoną nazwą (nazwami) halogenków (patrz P-67.2.3 gdzie zastosowano tę samą metodologię do nieorganicznych polikwasów).

Przykłady:

Cl-CO-O-CO-Cl
dichlorek dikarbonowy (PIN)

Cl-CO-O-CO-Br
bromek-chlorek dikarbonowy (PIN)

Cl-CO-NH-CO-Cl
dichlorek 2-imidodikarbonowy (PIN)

OCN-CO-O-CO-NCO
diizocyjanian dikarbonowy (PIN)

Cl-C(=NH)-NH-CO-S-C(S)-Br
5-bromek-1-chlorek 1,2-diimido-4,5-ditiotrikarbonowy (PIN)

P-65.5.3.3 Nazwy halogenków i pseudohalogenków acylowych wywodzących się z kwasu cyjanowego tworzy się na dwa sposoby:

(1) jako halogenki lub pseudohalogenki acylowe kwasu karbononitrydowego.
(2) przez umieszczenie nazwy halogenku lub pseudohalogenku przed nazwą kwasu.

Metoda (1) daje preferowane nazwy IUPAC.

Przykłady:

NC-Cl	$NC-N_3$
chlorek karbononitrydowy (PIN)	azydek karbononitrydowy (PIN)
chlorek cyjanowy	azydek cyjanowy

P-65.5.4 Halogenki i pseudohalogenki acylowe jako podstawniki

Gdy obecna jest inna grupa mająca pierwszeństwo jako grupa główna albo gdy halogenek lub pseudohalogenek acylowy jest przyłączony do innego podstawnika, jego nazwę tworzy się:

(1) jako przedrostka utworzonego z nazwy kwasu, na przykład ‘karbonochlorydoil’ ;

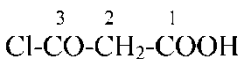
(2) jako złożonego przedrostka utworzonego z przedrostka halo lub halogeno i odpowiedniej, biwalencyjnej grupy acylowej, takiej jak ‘sulfonyl’, na przykład, fluorosulfonyl;

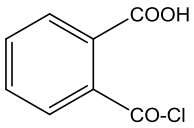
(3) na końcu acyklicznego łańcucha węglowego jako przedrostka określającego halogenek lub grupę pseudohalogenkową i przedrostek ‘okso’ lub odpowiednik chalkogenowy okso, taki jak sulfanyliden.

Metoda (1) daje preferowane nazwy IUPAC gdy przyrostek kwas –‘karboksylowy’ został użyty dla nazwania odpowiedniego kwasu; metoda (3) daje preferowane nazwy IUPAC dla acyklicznych łańcuchów węglowych.

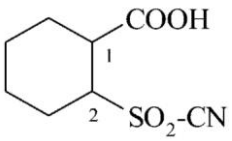
Starszeństwo w numerowaniu jest takie jak dla kwasów (patrz P-65.1.2.3 lub P-65.3.4). Starszeństwo dla halogenków i pseudohalogenków (patrz P-65.5.2.1).

Przykłady:

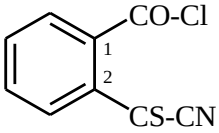




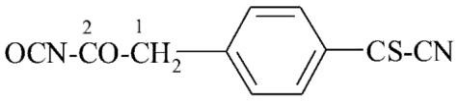
(3) kwas 3-chloro-3-oksopropanowy (PIN) (1) kwas 2-(karbonochlorydoilo)benzoesowy (PIN)
(1) kwas (karbonochlorydoilo)octowy (2) kwas 2-chlorokarbonylobenzoesowy



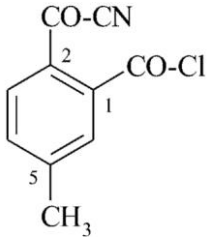
(1) kwas 2-(cyjanosulfonylo)cykloheksano-1-karboksylowy (PIN)
(2) kwas 2-sulfurocyjanidoilocykloheksano-1-karboksylowy



(1) chlorek 2-(karbonocyjanido)benzenokarbotioilu
(2) chlorek 2-(cyjanokarbonotioilo)benzoilu



cyjanek 4-(2-izocyjaniano-2-oksoetylo)benzenokarbotioilu (PIN)



chlorek 2-(karbonocyjanidoilo)-5-metylobenzoilu (PIN)
chlorek 2-(cyjanokarbonylo)-5-metylobenzoilu

$Br\text{-}CO\text{-}CO\text{-}CH_2\text{-}COOH$ (3) kwas 4-bromo-3,4-dioksobutanowy (PIN)

$Br\text{-}CO\text{-}O\text{-}CO\text{-}CH_2\text{-}COOH$ (1) kwas 3-[(karbonobromidoilo)oksy]-3-oksopropanowy (PIN)

P-65.6 SOLE I ESTRY

P-65.6.1 Ogólna metodologia
P-65.6.2 Sole
P-65.6.3 Estry, laktony i związki pokrewne

P-65.6.1 Ogólna metodologia

Obojętne sole i estry nazywa się używając nazwę anionu wywodzącego się z nazwy kwasu. Nazwy anionów tworzy się zamieniając końcówki kwas '-owy' nazwy kwasu na '-an' ('-ian') i końcówki kwas '–awy' na '-in'('yn'). Sole nazywa się wymieniając nazwy kationów, a estry - nazwy grup organylowych które wymienia się jako jako oddzielne słowa za nazwą anionu.

P-65.6.2 Sole

P-65.6.2.1 Obojętne sole kwasów nazywa się wymieniając nazwę anionu (patrz P-72.2.2.2) a następnie nazwy kationu (ów), jako oddzielnych słów. Różne kationy są wymieniane w porządku alfabetycznym. Tworzenie soli jest funkcjonalizacją a nie podstawieniem. Z tego względu, wszystkie zachowane nazwy, zarówno te stosowane jako preferowane nazwy IUPAC jak i te używane tylko w ogólnej nomenklaturze, mogą być używane bez ograniczeń. Ta reguła ma zastosowanie zarówno do kwasów nazywanych przy użyciu przyrostków oraz kwasów karbonowego, cyjanowego, szczawiowego a także kwasów polikarbonowych.

Przykłady:

$CH_3\text{-}CH_2\text{-}CH_2COO^-\ K^+$ $CH_3\text{-}CH_2\text{-}CS\text{-}S^-\ Na^+$

butanian potasu (PIN) propano(ditiolan) sodu (PIN)

$(CH_3\text{-}COO^-)_2\ Ca^{2+}$ $C_6H_5\text{-}SO\text{-}O^-\ Na^+$

dioctan wapnia (PIN)

butanodian potasu-sodu (PIN)
bursztynian potasu-sodu

benzenosulfinian sodu (PIN)

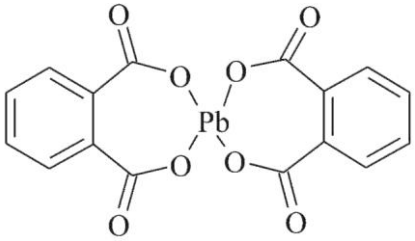
heksanodian amonu-potasu (PIN)
adypinian amonu-potasu

karbonian disodu(PIN)

tetraoctan germanu (PIN)

P-65.6.2.2 Cykliczne sole nazywa się jak heterocykle

Przykład:



3,3′-spirobi[[2,4,3]benzodioksaplumbepino]-1,1′,5,5′-tetraon (PIN)

P-65.6.2.3 Kwaśne sole

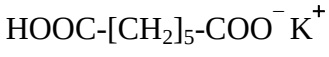
P-65.6.2.3.1 Kwaśne sole wielozasadowych kwasów organicznych nazywa się na dwa sposoby:

(1) stosując nomenklaturę podstawnikową, w której grupę karboksylową wymia się jako przedrostek nazwy anionu;

(2) tak jak obojętne sole, pozostałe kwasowe atomy wodoru wskazuje się słowem ‘wodoru’ (poprzedzonym w razie potrzeby odpowiednim numerycznym przedrostkiem ‘di’, ‘tri’, itd.) wstawionym bezpośrednio za nazwą anionu. Jeżeli jest taka potrzeba, to nazwy kationów są wymieniane w porządku alfabetycznym.

Metoda (1) daje preferowane nazwy IUPAC, z wyjątkiem przypadku gdy struktura kwasu jest nieznana. Anionowe podstawniki, takie jak $–COO^-$, $–SO_3^-$, $–SO_2^-$, opisuje się, odpowiednio, nazwami przedrostkowymi ‘karboksylano’, ‘sulfoniano’ i ‘sulfiniano’. Podobne zasady stosuje się do odpowiednich kwasów selenowych i tellurowych.

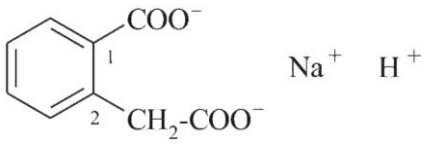
Przykłady:



(1) 6-karboksyheptanian potasu (PIN)
(2) heptanodian wodoru potasu

(1) 3-karboksypropanian amonu (PIN)
(2) butanodian wodoru amonu

bursztynian wodoru amonu



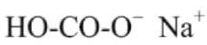
(2) 2-(karboksylanometylo)benzoesan wodoru sodu (PIN)

(2) propano-1,2,3-trikarboksylan wodoru potasu sodu

(1) tris(3-karboksypropanian) antymonu
(2) tris(butanian wodoru) antymonu

P-65.6.2.3.2 Preferowane nazwy IUPAC kwaśnych soli organicznych pochodnych wielozasadowych nieorganicznych oksokwasów (włączając kwas karbonowy) tworzy się stosując metodę (2).

Przykłady:



wodorowęglan sodu (PIN)

metylofosfonian wodoru potasu (PIN)

Uwaga: W nomenklaturze chemii nieorganicznej (IR-8.4, odn. 12), termin ‘wodoro’ pisze się bezpośrednio przed nazwą anionu, bez odstępu, żeby wskazać, że jest to część anionu.

diwodorofosforan sodu

P-65.6.3 Estry, laktony i związki pokrewne

P-65.6.3.1 Definicje
P-65.6.3.2 Ogólna metodologia
P-65.6.3.3 Preferowane przez IUPAC nazwy estrów
P-65.6.3.4 Pseudoestry
P-65.6.3.5 Cykliczne estr
P-65.6.3.6 Acylale

P-65.6.3.1 Definicje

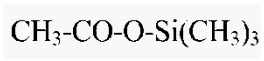
P-65.6.3.1.1 Estry organicznych oksokwasów, R-C(O)-O-R′ (R może być H) lub R-S(O)$_x$-O-R (R ≠ H) lub chalkogenowe analogi są związkami formalnie powstałymi z organicznych oksokwasów, R-

C(O)-O-H (R może być H) lub R-S(O)$_x$-OH (R ≠ H) i alkoholu, fenolu, heterolu lub enolu przez formalną utratę wody z kwasowej grupy hydroksylowej oksokwasu i grupy hydroksylowej alkoholu, fenolu, heterolu lub enolu. W szerszym ujęciu są one ‘acylowymi’ pochodnymi alkoholi, itd. Włączone są tu również estry wywodzące się z chalkogenowych analogów organicznych oksokwasów i chalkogenowych analogów alkoholi (tioli, selenoli, telluroli), fenoli, heteroli i enoli, np., acylowe pochodne chalkogenowych analogów alkoholi (tioli, selenoli, telluroli), fenoli, heteroli i enoli.

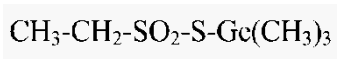
Estry wywodzące się z nieorganicznych kwasów, patrz P-67.

P-65.6.3.1.2 Pseudoestry są to związki mające ogólny wzór R-E(=O)$_x$(OZ) i ich chalkogenowe analogi, gdzie x = 1 lub 2, a Z nie jest atomem węgla ale jednym z następujących pierwiastków: B, Al, In, Ga, Tl, Si, Ge, Sn, Pb, Bi. Pseudoestry są równoważne estrom w szeregu starszeństwa klas (patrz P-41).

Przykłady:



octan trimetylosililu (PIN)

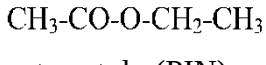


etanosulfonotionian *S*-(trimetylogermanylu) (PIN)

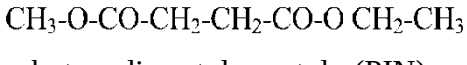
P-65.6.3.2 Ogólna metodologia

P-65.6.3.2.1 Wszystkie preferowane nazwy IUPAC estrów tworzy się z użyciem nomenklatury klasowo-funkcyjnej.

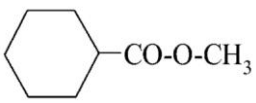
Przykłady:



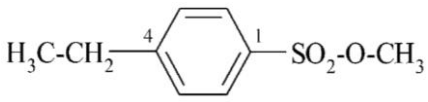
octan etylu (PIN)



butanodian etylu-metylu (PIN)



cykloheksanokarboksylan metylu (PIN)



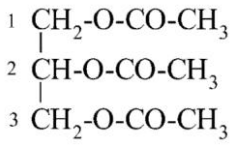
4-etylobenzeno-1-sulfonian metylu (PIN)

P-65.6.3.2.2 Multiplikacyjne klasowo-funkcyjne nazwy estrów

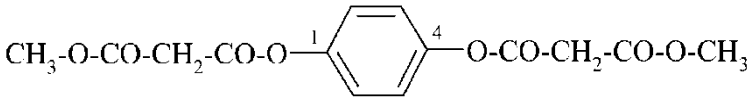
W nomenklaturze klasowo-funkcyjnej estrów operacji multiplikacji (P-13.6.2) używa się do nazwania zespołów identycznych macierzystych komponentów anionowych połączonych przez di- lub multiwalencyjny komponent ‘hydroksylowy’.

> To jest zmiana w zastosowaniu operacji multiplikacji do estrów, w porównaniu z poprzednimi rekomendacjami. Bi- lub poliwalencyjną nazwę klasowo-funkcyjną wymienia się jako grupę organylową (alkanodiyl, arylen, itp.) i umieszcza bezpośrednio za nazwą składnika kwasowego określoną przez nazwę anionu wywodzącą się z odpowiedniego kwasu (patrz P-72.2.2.2.1), a nie alfabetycznie wraz z innymi monowalencyjnymi grupami organylowymi, jak to miało miejsce w poprzednich zaleceniach.

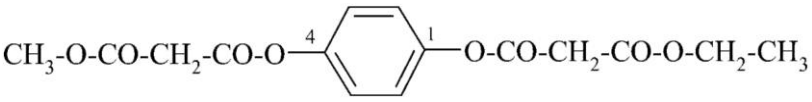
Przykłady:



trioctan propano-1,2,3-triylu



dipropanodian 1,4-fenylenu dimetylu (PIN)
bis(propanodian metylu) 1,4-fenylenu



dipropanodian etylu 1,4-fenylenu metylu (PIN)

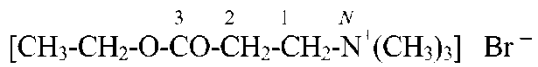
P-65.6.3.2.3 Estry wymieniane jako przedrostki

Jeżeli w estrze o ogólnym wzorze R-CO-O-R′ lub R-S(O)$_x$-OR obecna jest inna grupa mająca pierwszeństwo przy wyborze grupy głównej lub gdy nie wszystkie grupy estrowe mogą być uwzględnione przy użyciu metod stosowanych do nazywania estrów, grupę estrową wskazuje się przedrostkiem ‘acyloksy’ dla grupy R-CO-O- i ‘alkoksy(alkanylo)…okso’ lub ‘alkilo(alkanylo)oksokarbonylo’ dla grupy –CO-OR′.

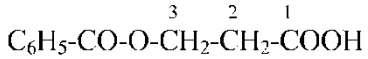
Systematyczna nazwa ‘acetyloksy’ jest preferowana w stosunku do skróconej nazwy ‘acetoksy’, która może być używana w nomenklaturze ogólnej.

Starszeństwo przy numerowaniu jest takie jak w kwasach (patrz P-65.1.2.3 lub P-65.3.4).

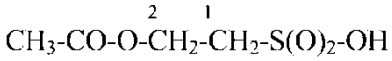
Przykłady:



bromek 3-etoksy-*N*,*N*,*N*-trimetylo-3-oksopropano-1-aminium (PIN)
bromek [2-(etoksykarbonylo)etylo]- *N*,*N*,*N*-trimetyloamonium
bromek (3-etoksy-3-oksopropylo)- *N*,*N*,*N*-trimetyloazanium



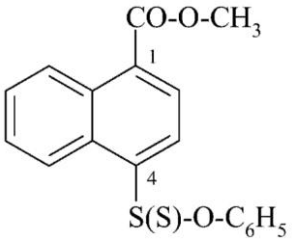
kwas 3-(benzoiloksy)propanowy (PIN)



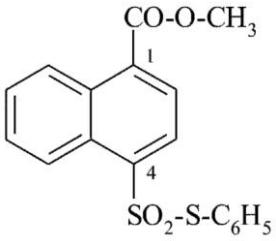
kwas 2-(acetyloksy)etano-1-sulfonowy (PIN)

kwas 3-[(fenylokarbonylo)oksy]propanowy

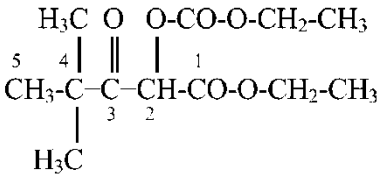
kwas 2-acetoksyetanosulfonowy



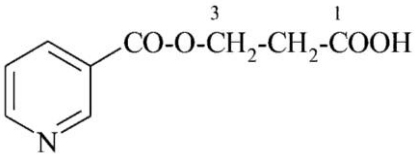
4-(fenoksysulfinotioilo)naftaleno-1-karboksylan metylu (PIN)



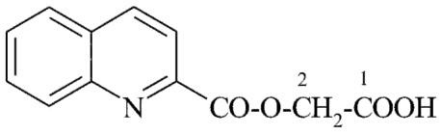
4-[(fenylsulfanylo)sulfonylo]nafaleno-1-karboksylan metylu (PIN)



2-[(etoksykarbonylo)oksy]-4,4-dimetylo-3-oksopentanian etylu (PIN)



kwas 3-[(pirydyno-3-karbonylo)oksy]propanowy (PIN)
kwas 3-(nikotynoiloksy)propanowy



kwas [(chinolino-2-karbonylo)oksy]octowy (PIN)
kwas [(chinolin-2-ylokarbonylo)oksy]octowy; patrz P-65.4.1 jak nazywać grupy acylowe wywodzące się z kwasów)

P-65.6.3.3 Preferowane przez IUPAC nazwy estrów

P-65.6.3.3.1 Monoestry
P-65.6.3.3.2 Poliestry wywodzące się z pojedynczych składników kwasowych
P-65.6.3.3.3 Poliestry utworzone z pojedynczego składnika ‘alkoholowego’
P-65.6.3.3.4 Poliestry wywodzące się z wielu składników kwasowych i wielu składników ‘alkoholowych’
P-65.6.3.3.5 Częściowe estry z wielozasadowych kwasów i soli
P-65.6.3.3.6 Nomenklatura podstawnikowa jest ważniejsza od nomenklatury klasowo-funkcyjnej przy tworzeniu preferowanych nazw IUPAC estrów
P-65.6.3.3.7 Estry kwasów modyfikowanych zamianą funkcji

P-65.6.3.3.1 Monoestry

Monoestry utworzone z monozasadowego kwasu i składnika ‘monohydroksylowego’ nazywa się systematycznie umieszczając składnik ‘hydroksylowy’ określony przez grupę organylową (alkil, aryl, itp.) po nazwie składnika kwasowego wyrażonego jako anion wywodzący się z odpowiedniego kwasu (patrz P-72.2.2.2.1).

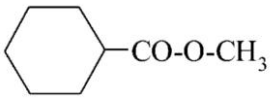
Przykłady:

$CH_3CO\text{-}O\text{-}CH_2\text{-}CH_3$

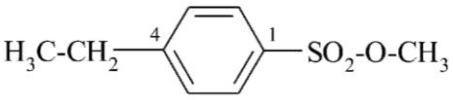
octan etylu (PIN)

$CH_3\text{-}[CH_2]_6\text{-}CO\text{-}O\text{-}C(CH_3)_3$

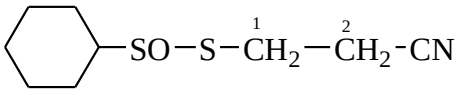
oktanian *tert*-butylu (PIN)
oktanian 1,1-dimetyloetylu



cykloheksanokarboksylan metylu (PIN)



4-etylobenzeno-1-sulfonian metylu (PIN)

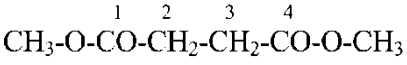


cycloheksanosulfinotian *S*-(2-cyjanoetylu) (PIN)
{nie 3-[(cycloheksanosulfinylo)sulfanylo]propanonitryl;
ani 3-[(cycloheksylosulfinylo)sulfanylo]propanonitryl; nazywanie grup acylowych utworzonych z kwasów patrz P-65.4.1}

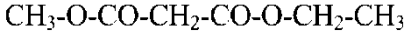
P-65.6.3.3.2 Poliestry wywodzące się z pojedynczych składników kwasowych

P-65.6.3.3.2.1 Systematyczną nazwę całkowicie zestryfikowanego kwasu wywodzącego się z pojedynczego kwasu tworzy się umieszczając nazwy składników hydroksylowych opisanych jako grupa (y) organylowa (e) (alkil, aryl, itp.) jako oddzielne słowo (a) po nazwie składnika kwasowego czyli nazwie anionu wywodzącego się z odpowiedniego kwasu (patrz P-72.2.2.2.1). Gdy jest wiele identycznych grup organylowych, używa się przedrostków multiplikacyjnych; różne grupy organylowe wymienia się w porządku alfabetycznym (patrz P-14.5). Gdy jest to konieczne przed grupami organylowymi umieszcza się lokanty.

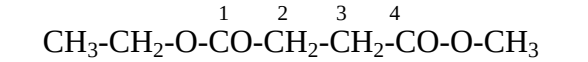
Reguły te odnoszą się zarówno do kwasów karboksylowych, sulfonowych, sulfinowych itp.
Przykłady:



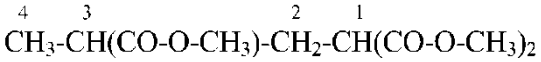
butanodian dietylu (PIN)
bursztynian dimetylu



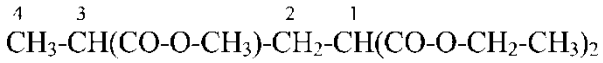
propanodian etylu-metylu (PIN)
malonian etylu-metylu



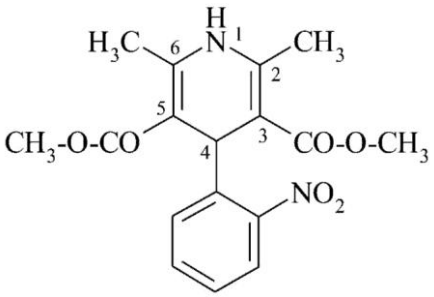
butanodian etylu-metylu (PIN)



butano-1,1,3-trikarboksylan trimetylu (PIN)



butano-1,1,3-trikarboksylan 1,1-dietylu-3-metylu (PIN)



2,6-dimetylo-4-(2-nitrofenylo)-1,4-dihydropirydyno-3,5-dikarboksylan dimetylu (PIN)

butanodian 4-[(3-etoksy-3-oksopropanoilo)oksy]fenylu-metylu (PIN)
(nie propanodian etylo 4-[(4-metoksy-4-oksobutanoilo)oksy]fenylu; etoksy… jest alfabetycznie preferowany w stosunku do etyl…)

P-65.6.3.3.2.2 Nazwy poliestrów tworzone w nomenklaturze multiplikacyjnej

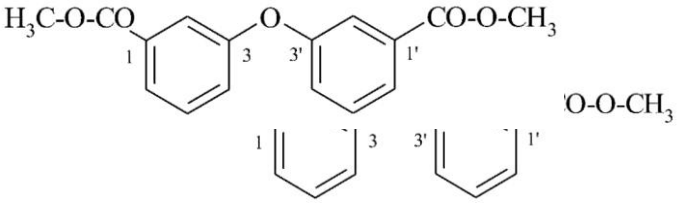
P-65.6.3.3.2.2.1 Estry o składnikach kwasowych, których preferowane nazwy IUPAC utworzone są przy użyciu nomenklatury multiplikacyjnej, można nazywać dwiema metodami:

(1) wszystkie organylowe składniki reprezentujące ‘hydroksylowe’ komponenty umieszcza się za nazwą zwielokrotnionego składnika kwasowego;

(2) estry, w których oba składniki organylowe reprezentujące komponent ‘hydroksylowy’ są takie same, składnik kwasowy poprzedza się członem numerycznym ‘bis-, ‘tris-‘ itd.

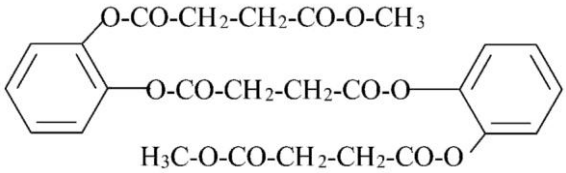
Metoda (1) daje preferowane nazwy IUPAC.

Przykłady:



(1) 3,3′-oksydibenzoesan dimetylu (PIN)
(2) 3,3′-oksydi(benzoesan metylu)

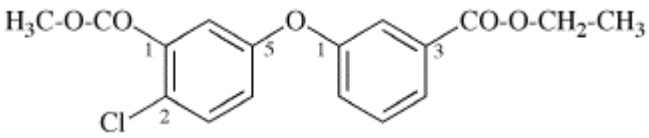
(1) 3,3′-oksydibenzoesan etylu-metylu



(1) dibutanodian butanodioilobis(oksy-2,1-fenylenu)-dimetylu (PIN)
(nie butanodian bis[2-(4-metoksy-4-oksobutanoilo)oksy]fenylu;
PIN wyraża dwa macierzyste kwasy dikarboksylowe)
(2) di(butanodian metylu) butanodioilobis(oksy-2,1-fenylenu)

P-65.6.3.3.2.2.2 Estry, dla których nie można utworzyć nazw multiplikacyjnych, jak powyżej, nazywa się jako monoestry a pozostałe składniki estrowe wyraża się przedrostkami w nomenklaturze podstawnikowej. Multiplikacyjne nazwy mogą być stosowane w nomenklaturze ogólnej [patrz P-15.3.0(2) i P-51.3.1].

Przykład:



2-chloro-5-[3-(etoksykarbonylo)fenoksybenzoesan metylu
(nie 3-[4-chloro-3-(etoksykarbonylo)fenoksy]benzoesan etylu;
1-metylo-6-chloro-3,3′-oksydibenzoesan 1′-etylu (ta nazwa multiplikacyjna jest akceptowana tylko w nomenklaturze ogólnej)

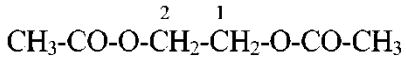
P-65.6.3.3.3 Poliestry utworzone z pojedynczego komponentu ‘alkoholowego’

Estry wywodzące się z pojedynczego komponentu ‘polihydroksylowego’ nazywa się umieszczając nazwy ‘polihydroksylowego’ komponentu określonego przez wielowartościową grupę

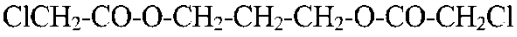
organylową (alkil, aryl, itp. za nazwą (ami) komponentu kwasowego określonego przez anionową nazwę wywodzącą się z odpowiedniego (odpowiednich) kwasów (patrz P-72.2.2.2.1).

P-65.6.3.3.3.1 Gdy aniony są identyczne, używa się multiplikacyjnej nomenklatury klasowo-funkcyjnej. Nazwy tworzy się wymieniając nazwy wielowartościowej grupy, multiplikacyjnego przedrostka i zmultiplikowanego składnika anionowego. Gdy anion jest niepodstawiony, używa się przedrostków zwielokrotniających ‘di’, ‘tri’, itd., a gdy jest podstawiony, przedrostków ‘bis’, ‘tris’, itd.

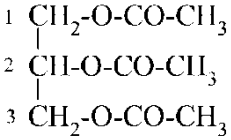
Przykłady:



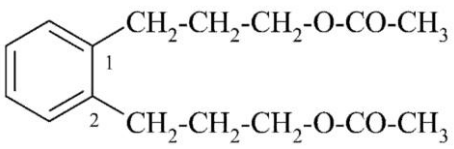
dioctan etano-1,2-diylu (PIN)



bis(chlorooctan) propano-1,3-diylu (PIN)



trioctan propano-1,2,3-triylu (PIN)



dioctan 3,3′-(1,2-fenyleno)dipropylu [PIN; patrz P-15.3.0(2) i P-51.3.1]

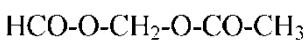
P-65.6.3.3.3.2 Gdy aniony są różne, stosuje się dwie metody:

(1) nazwy anionów wymienia się w porządku alfabetycznym i, gdy jest to konieczne, poprzedza je lokantem; aby określić wielokrotność identycznych składników anionowych używa się przedrostków zwielokrotniających;

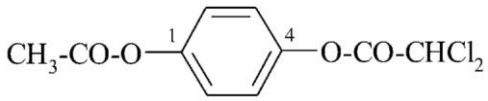
(2) wybiera się jeden z anionów jako anion główny, a wszystkie inne grupy estrowe wymienia się jako przedrostki w nazwie grupy organylowej. Szereg starszeństwa anionów odpowiada temu dla kwasów (patrz szereg starszeństwa kwasów w P-41).

Metoda (1) daje preferowane nazwy IUPAC. ale w nomenklaturze ogólnej dopuszczalne są nazwy utworzone przy użyciu metody (2).

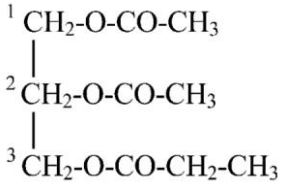
Przykłady:



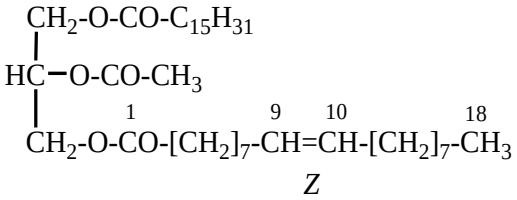
(1) octan-mrówczan metylenu (PIN)
(2) octan (formyloksy)metylu



(1) octan-dichlorooctan 1,4-fenylenu (PIN)
(2) dichlorooctan 4-(acetyloksy)fenylu



(1) 1,2-dioctan-3-propanian propano-1,2,3-triylu (PIN)
(2) propionian 2,3-bis(acetyloksy)propylu



2-octan 1-heksadekanianu-3-[(9*Z*)-oktadekan-9-ian (2*S*)-propano-1,2,3-triylu] (PIN)
(9*Z*)-oktadekan-9-ian (2*S*)-2-(acetyloksy)-3-(heksadekanoiloksy)propylu

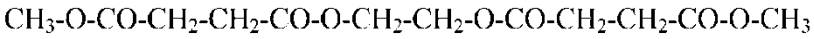
P-65.6.3.3.4 Poliestry wywodzące się z wielu kwasów i wielu składników alkoholowych

Gdy spełnione są konkretne warunki wymagane do ich użycia, stosuje się nomenklaturę multiplikacyjną, nomenklaturę zamienną szkieletu (‘a’) lub nomenklaturę fanów.

P-65.6.3.3.4.1 Nazwy poliestrów tworzy się stosując multiplikacyjną nomenklaturę klasowo-funkcyjną.

Nazwy symetrycznych estrów tworzy się włączając organylowy składnik w zmultiplikowaną nazwą składnika anionowego. W niesymetrycznych estrach składniki organylowe wymienia się w porządku alfabetycznym.

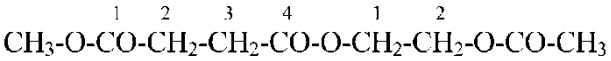
Przykłady:



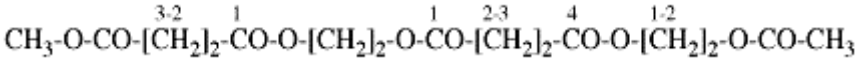
dibutanodian dimetylu-etano-1,2-diylu (PIN)
bis(butanodian metylu) etano-1,2-diylu

P-65.6.3.3.4.2 Nazwy poliestrów tworzone przy użyciu nomenklatury podstawnikowej i/lub nomenklatury multiplikacyjnej oraz klasowo-funkcyjnej

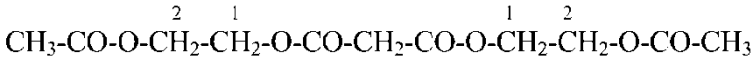
Poliestry, które nie mogą być nazwane multiplikacyjną nomenklaturą klasowo-funkcyjną, jak opisno powyżej, nazywa się używając nomenklatury podstawnikowej do utworzenia nazwy podstawników organylowych i anionów. Gdy jest to konieczne, dla utworzenia nazwy alkoholowego składnika funkcyjnej klasy estru, stosuje się starszeństwo pierścieni, układów pierścieni i łańcuchów; numer i położenie podstawnika; i szereg alfanumeryczny (patrz P-41 do P-45):
Przykłady:



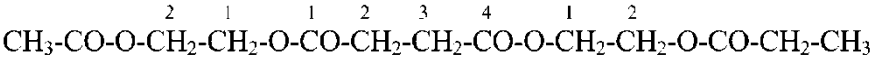
butanodian 2-(acetyloksy)etylu-metylu (PIN)
butanodian 2-acetoksyetylu-metylu



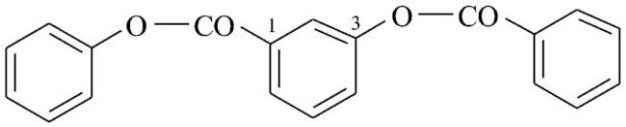
dibutanodian 2-(acetyloksy)etylu-metylu-etano-1,2-diylu (PIN)



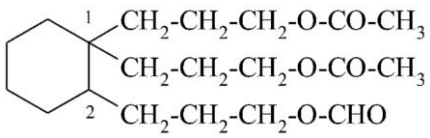
propanodian bis[2-(acetyloksy)etylu] (PIN)
dioctan propanodioilobis(oksyetano-2,1-diylu)



butanodian 2-(acetyloksy)etylu-2-(propanoiloksy)etylu (PIN)
octan-propanian butanodioilobis(oksyetano-2,1-diylu)

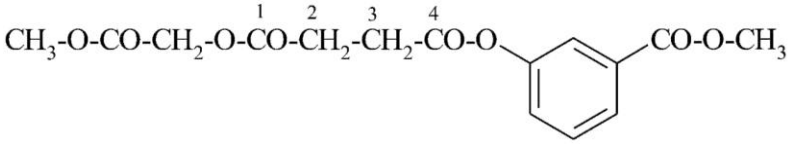


3-(benzoiloksy)benzoesan fenylu (PIN)
[nie benzoesan 3-(fenoksykarbonylo)fenylu; podstawiony kwas benzoesowy jest starszy niż niepodstawiony; patrz P-45.2.1]

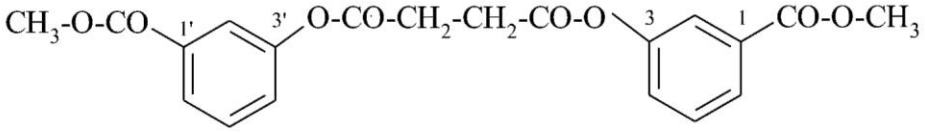


dioctan 3,3′-{2-[3-(formyloksy)propylo]cyloheksano-1,1-diylo}dipropylu (PIN)

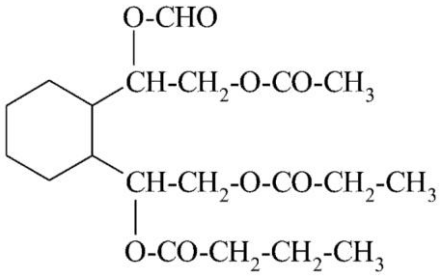
butanodian 4-[(3-etoksy-3-oksopropanoilo)oksy]fenylu-metylu (PIN)
(nie propanodian etylu-4-[(4-metoksy-4-oksobutanoilo)okso]fenylu;
kwas butanodiowy jest preferowany w stosunku do kwasu propanowego)



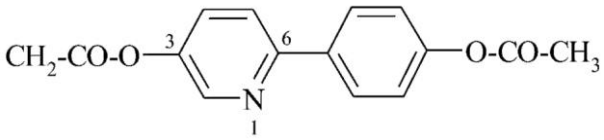
butanodian 3-(metoksykarbonylo)fenylu-2-metoksy-2-oksoetylu (PIN)
[nie butanodian 2-metoksy-2-oksoetylu-3-(metoksykarbonylo)fenylu]



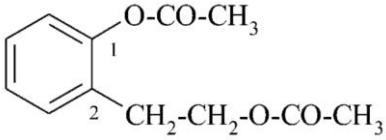
butanodian bis[3-(metoksykarbonylo)fenylu] (PIN)
(nie 3,3′-[butanodioilobis(oksy)]dibenzoesan dimetylu;
kwas dikarboksylowy jest starszy niż dwa monokarboksylowe)



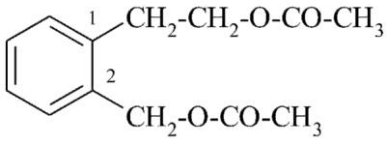
butanian 1-{2-[2-(acetyloksy)-1-(formyloksy)etylo]cykloheksylo}-2-(propanoiloksy)etylu (PIN)



octan 6-[4-(acetyloksy)fenylo]pirydyn-3-ylu (PIN)
(nie octan 4-[5-(acetyloksy)pirydyn-2-ylo]fenylu;
pierścień z azotem jest starszy niż karbocykliczny)



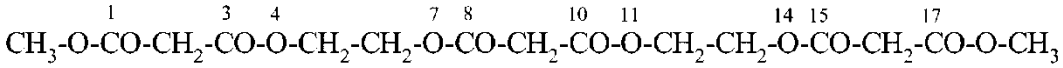
octan 2-[2-(acetyloksy)fenylo]etylu (PIN)
(nie octan 2-[2-(acetyloksy)fenyloetylu; pierścień jest starszy niż łańcuch)



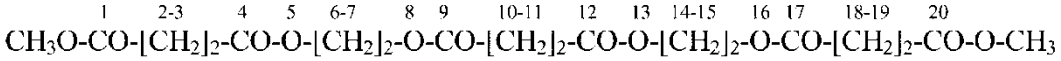
octan 2-{2-[(acetyloksy)metylo]fenylo}etylu (PIN)

P-65.6.3.3.4.3 Nazwy poliestrów tworzone przy użyciu nomenklatury klasowo-funkcyjnej i nomenklatury zamiennej szkieletu (‘a’):

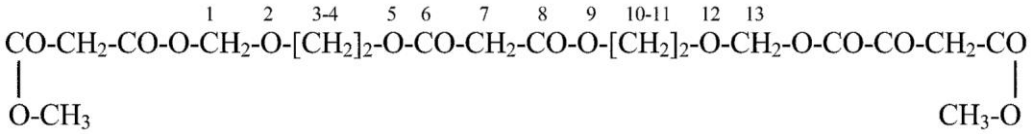
Przykłady:



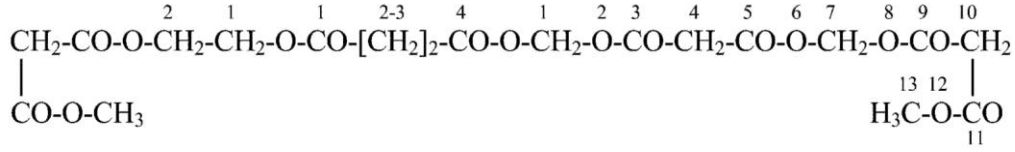
3,8,10,15-tetraokso-4,7,11,14-tetraoksaheptadekano-1,17-dian dimetylu (PIN)
[nazwa klasowo-funkcyjna, w której fragment anionowy jest nazwany nomenklaturą zamienną szkieletu (‘a’)]
dipropanodian dimetylu-metylenobis(karbonyloksyetano-2,1-diylu)
(nazwa klasowo-funkcyjno-multiplikacyjna)



4,9,12,17-tetraokso-5,8,13,16-tetraoksaikozano-1,20-dian dimetylu (PIN)
[nazwa klasowo-funkcyjna, w której fragment anionowy jest nazwany nomenklaturą zamienną szkieletu (‘a’)]
dibutanodian dimetylu-etano-1,2-diylobis(karbonyloksyetylu)
(nazwa klasowo-funkcyjno-multiplikacyjna)



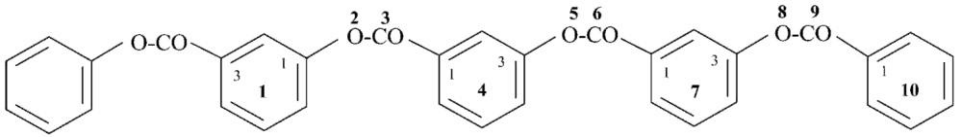
dipropanodian dimetylu-6,8-diokso-2,5,9,12-tetraoksatridekano-1,13-diylu (PIN)
[nazwa klasowo-funkcyjna, w której fragment zmultiplikowany jest nazwany nomenklaturą zamienną szkieletu (‘a’)]
dipropanodian di metylu-propanodioilobis(oksyetano-2,1-diyloksymetylenu
(nazwa klasowo-funkcjonalno-multiplikacyjna)



butanodian 2-({[(metoksykarbonylo)acetylo]oksy}etylu)- 3,5,9,11-tetraokso-2,6,8,12-tetraoksatridekanylu (PIN) [nazwa klasowo-funkcyjna, w której jeden fragment alkoholowy jest nazwany nomenklaturą zamienną szkieletu (‘a’)]

P-65.6.3.3.4.4 Nazwy poliestrów tworzy się używając nomenklatury grupowo-funkcyjnej i nomenklatury fanów.

Przykłady:



3,6,9-triokso-2,5,8-trioksa-1,10(1),4,7(1,3)-tetrabenzenadekafano-1^3-karboksylan fenylu (PIN)
2,7,9,14,16,21-heksaokso-3,6,10,13,17,20-heksaoksa-1,22(1),8,15(1,3)-tetrabenzenadokozafano-1^3,22^3-dikarboksylan dimetylu (PIN)

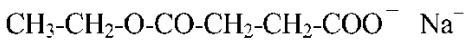
P-65.6.3.3.5 Częściowe estry wielozasadowych kwasów i ich sole nazywa się dwiema metodami:

(1) podstawnikowo, na bazie anionu, wolnych grup kwasowych i grup estrowych wymienianych jako przedrostki;

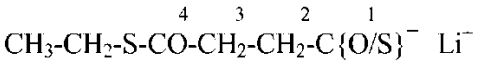
(2) stosując zasady słownictwa obojętnych estrów i soli kwasów; składniki nazwy wymienia się w następującym porządku: nazwa anionu, słowo ‘wodór’ (w dopełniaczu) nazwa grupy węglowodorowej, nazwa kationu. W razie potrzeby dodaje się lokanty liczbowe i pisane kursywą symbole pierwiastków (zobacz P-65.1.5.1). Kiedy metodę wodorową stosuje się do nazw zwyczajowych, zachowana jest numeracja polizasadowych kwasów.

Metoda (1) daje nazwy preferowane przez IUPAC.

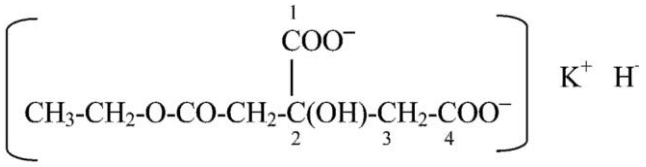
Przykłady:



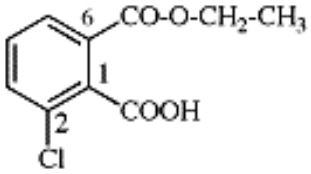
(1) 4-etoksy-4-oksobutanian sodu
(2) bursztynian etylu-sodu



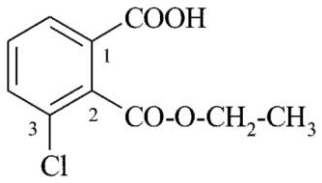
(1) 4-(etylsulfanylo)-4-oksobutanotian litu
(2) butanobis(tian) *S*-etylu-litu



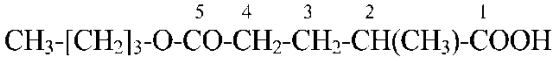
(1) 2-(2-etoksy-2-oksoetylo)-2-hydroksybutanodian potasu (PIN)
(2) 2-hydroksypropano-1,2,3-trikarboksylan wodoru-1-etylu-potasu
(2) cytrynian wodoru-5-etylu-potasu



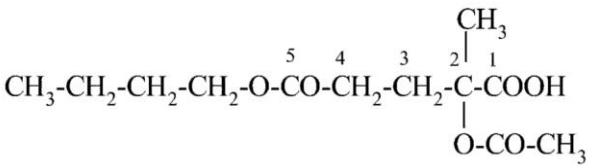
(1) kwas 2-chloro-6-(etoksykarbonylo)benzoesowy
(2) 3-chlorobenzeno-1,2-dikarboksylan wodoru-1-etylu
(2) 3-chloroftalan wodoru-1-etylu



(1) kwas 3-chloro-2-(etoksykarbonylo)benzoesowy (PIN)
(2) 3-chlorobenzeno-1,2-dikarboksylan wodoru-2-etylu
(2) 3-chloroftalan wodoru-2-etylu



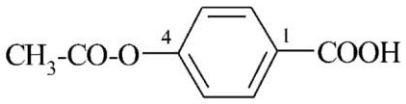
(1) kwas 5-butoksy-2-metylo-5-oksopentanowy (PIN)
(2) 2-metylopentanodian wodoru-5-butylu



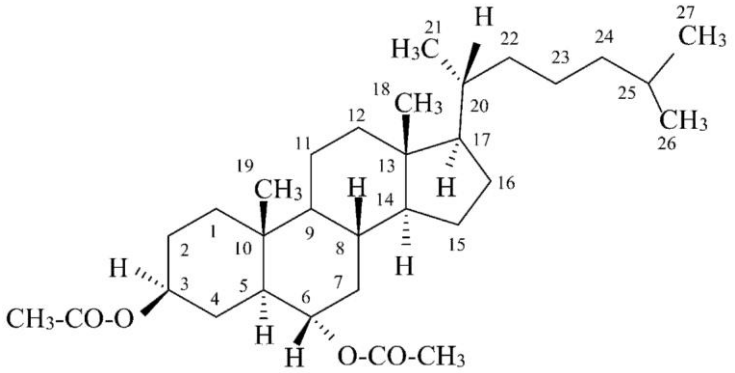
(1) kwas 2-(acetyloksy)-5-butoxy-2-metylo-5-oksopentanowy
(2) 2-(acetyloksy)-2-metylopentanodian wodoru-5-butylu

P-65.6.3.3.6 IUPAC przedkłada dla estrów nomenklaturę podstawnikową nad grupowo-funkcyjną .

Przykłady:



kwas 4-(acetyloksy)benzoesowy (PIN)
octan kwasu 4-hydroksybenzoesowego



dioctan 5α-cholestano-3β,6α-diylu
dioctan 5α-cholestano-3β,6α-diolu

P-65.6.3.3.7 Estry kwasów modyfikowane nomenklaturą zamienną funkcji

P-65.6.3.3.7.1 Za wyjątkiem nazw zwyczajowych, kwasów polikarbonowych i kwasu cyjanowego opisanych w P-65.6.3.3.3, nazwy estrów wywodzą się od zmodyfikowanych zamianą funkcji nazw kwasów, których nazwy podstawnikowe są tworzone systematycznie, jak wskazano w P-65.1.3 do P-65.1.7.

Strukturalne różnice w budowie estrów kwasów tio-, seleno- lub tellurokarboksylowych, kwasów tio-, seleno- lub tellurosulfonowych i sulfinowych oraz ich peroksowych analogów wskazuje się pisanym kursywą symbolem właściwego pierwiastka, na przykład *S*, *O*, lub *SO*, poprzedzającym nazwę reszty organicznej.

Przykłady:

CH_3-[CH_2]$_4$-CO-S-CH_2-CH_3 CH_3-[CH_2]$_4$-CSe-O-CH_2-CH_3

heksanotian *S*-etylu (PIN) heksanoselenian *O*-etylu (PIN)

CH_3-C(=NH)-O-CH_3 CH_3-CH_2-C(=N-NH_2)-O-C_2H_5

etanoimidan metylu (PIN)
acetimidan metylu

propanohydrazonian etylu (PIN)
propionohydrazonian etylu

C_6H_5-C(=NH)-S-CH_3 benzenokarboksyimidotian metylu (PIN)

C_6H_5-C(=N-SH)-S-CH_2-CH_3 *N*-sulfanylobenzenokarboksyimidotian etylu (PIN)

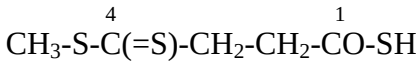
C_6H_5-CO-S-O-CH_3 benzeno(karbotioperoksolan) *SO*-metylu (PIN)

CH_3-CH_2-SO_2-O-S-C_2H_5 etanosulfono(tioperoksolan) *OS*-etylu (PIN)

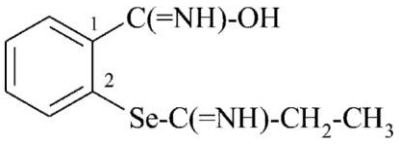
CH_3-S-CO-CO-S-CH_3 etanobis(tian) *S*,*S*-dimetylu (PIN)

W przypadku obecności grup charakterystycznych o wyższym starszeństwie wymieniania w przyrostku, grupę estrową wskazuje się odpowiednimi przedrostkami zależnie od podstawienia grup, na przykład ‘acylosulfanyl’ dla grup -S-CO-R lub ‘(alkilosulfanylo)karbonotioil’ lub ‘(alkilosulfanylo)…sulfanyliden’ dla grup –CS-SR.

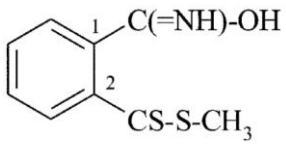
Przykłady:



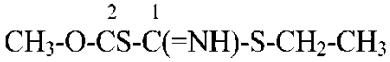
S-kwas 4-(metylosulfanylo)-4-sulfanylidenobutanotiowy (PIN)



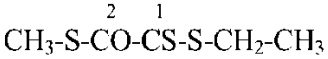
kwas 2-[propanoimidoilo)selanylo]benzeno-1-karboksyimidowy (PIN)



kwas 2-[(metylosulfanylo)karbonotioilo]benzeno-1-karboksyimidowy (PIN)



(etylosulfanyl)(imino)etanotian *O*-metylu (PIN)



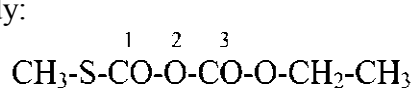
(etylosulfanylo)(sulfanylideno)etanotian *S*-metylu

2-{4-[(2-metoksy-2-sulfanylidenoacetylo)oksy]fenoksy}-2-sulfanylidenooctan metylu (PIN)
[nie 2-{4-[(2-metoksy-2-oksoetanotioilo)oksy]fenoksy}-2-oksoetanotian *O*-metylu;
nazwa PIN posiada korzystniejszy porządek alfabetyczny)

P-65.6.3.3.7.2 Estry kwasu karbonowego, kwasu cyjanowego i kwasów polikarbonowych zmodyfikowane w nazwach zamiennych funkcji.

P-65.6.3.3.7.2.1 Nazwy kwasów zmodyfikowane zamianą funkcji służą do tworzenia preferowanych przez IUPAC nazw odpowiednich estrów. Symbole pierwiastków *O*, *S*. etc. i lokanty wykorzystuje się do określenia położenia ugrupowań organicznych.

Przykłady:



1-tiodikarbonian 3-etylu-1-*S*-metylu-

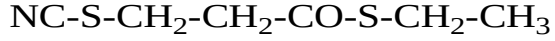
ditiokarbonian *O*,*S*-dimetylu (PIN)

tiocyjanian propan-2-ylu

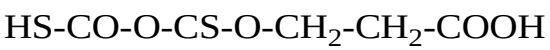
P-65.6.3.3.7.2.2 W przypadku obecności grup charakterystycznych o wyższym starszeństwie, wymieniania w przyrostku grupę estrową wskazuje się odpowiednimi przedrostkami zgodnie ze sposobem podstawienia grup.

Przykłady:

kwas {[(metylosulfanylo)(sulfanylideno)acetylo]oksy}etano(ditiowy) (PIN)



3-(tiocyjaniano)propanotian *S*-etylu (PIN)



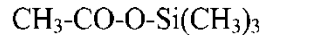
kwas 3-({[(sulfanylokarbonyl)oksy]karbonotioil}okso)propanowy (PIN)

P-65.6.3.4 Pseudoestry

Związki o ogólnym wzorze R-CO-OE, w których E nie jest atomem węgla ani grupą acylową zalicza się do tej klasy (zobacz P-65.6.3.1.2). Nazwy klasowo-funkcyjne tych związków tworzy się tak jak estrów.

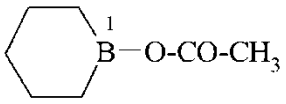
P-65.6.3.4.1 Gdy 'E', w R-CO-O-E, jest pierwiastkiem z następującej listy: B, Al, In, Ga, Tl, Si, Ge, Sn, Pb, N(w pierścieniu), P, As, Sb, Bi, to pseudoester nazywa się jak tradycyjny ester, chyba że nazwę należy utworzyć zgodnie z porządkiem starszeństwa klas związków w malejącym w szeregu: sole > kwasy > bezwodniki > estry. Dla bezwodników, zobacz P-65.7.

Przykłady:

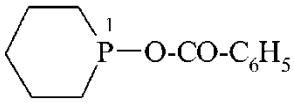


octan trimetylosililu

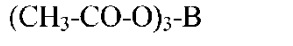
etanotiosulfonian *S*-(trimetylogermanylu) (PIN)



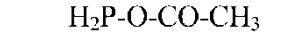
octan boran-1-ylu (PIN)



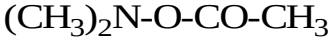
benzoesan fosfan-1-ylu (PIN)



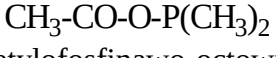
trianhydryd borowo-trioctowy (PIN)



anhydryd fosfinawo-octowy (PIN)



O-acetylo-*N*,*N*-dimetylohydroksyloamina (PIN)
(hydroksyloamina jest zachowaną nazwą preferowaną przez IUPAC; zobacz P-68.3.1.1.1)



anhydryd dimetylofosfinawo-octowy (PIN; zobacz P-67.1.3.3)

P-65.6.3.4.2 Gdy 'E' jest pierwiastkiem należącym do grupy 16, pseudoestry nazywa się jak pseudoketony (zobacz P-68.4.2.4)

Przykłady:

CH_3-CH_2-CH_2-CO-S-OO-CH_3 [1-(metyloperoksy)sulfanylo]butan-1-on
(nie butanotian *S*-metyloperoksylu

P-65.6.3.5 Estry cykliczne

Związki, które można uważać za utworzone w wyniku wewnątrzcząsteczkowej eliminacji wody z kwasów hydroksykarboksylowych lub kwasów hydroksysulfonowych klasyfikuje się, odpowiednio, jako ‘laktony’ i ‘sultony’. Dla tych związków preferowana przez IUPAC jest nomenklatura heterocykliczna. Nazwy utworzone od odpowiednich hydroksykwasów nie są zalecane, ale mogą być używane w nomenklaturze ogólnej.

P-65.6.3.5.1 Laktony

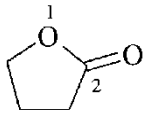
Wewnątrzcząsteczkowe estry hydrokwasów karboksylowych noszą nazwę ‘laktony’ i są nazywane trzema metodami.

(1) Jako heterocykliczne pseudoketony, dodając do nazwy heterocyklicznych macierzystych wodorków przyrostek ‘on’, ‘dion’, ‘tion’, etc. i odpowiednie przedrostki zwielokrotniające .

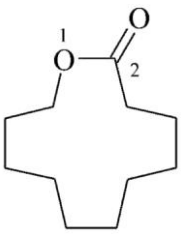
(2) Zmieniając końcówkę ‘-wy’ systematycznej nazwy nie hydroksylowego kwasu ‘kwas -owy’na ‘-olakton’ i umieszczając lokant (potencjalnej) grupy hydroksylowej pomiędzy ‘o’ i ‘lakton’.

(3) Zamieszczając określenie ‘karbolakton’ (wskazujące grupę –O-CO- w pierścieniu lub układzie cyklicznym) po nazwie odpowiedniego macierzystego wodorku poprzedzone parą lokantów opisujących odpowiednio miejscu dołączenia grupy karbonylowej i atomu tlenu; lokant grupy karbonylowej jest wymieniany jako pierwszy i, jeżeli istnieje wybór, uzyskuje niższą wartość. Przedrostki zwielokrotniające i pary lokantów oddziela się dwukropkiem w celu wskazania dwóch lub więcej pierścieni sulfonu lub sultinu.

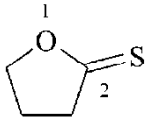
Metoda (1) jest preferowana przez IUPAC.
Przykłady:



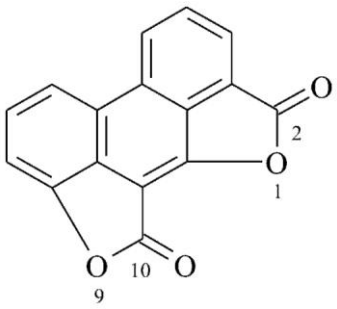
oksolan-2-on (PIN)
tetrahydrofuran-2-on
butano-4-lakton
(nie γ-butyrolakton)



1-oksacyklododekan-2-on (PIN)
dodekano-12-lakton



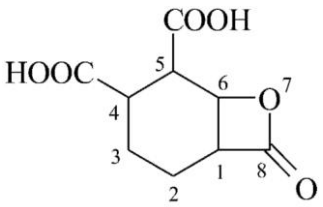
oksolano-2-tion (PIN)



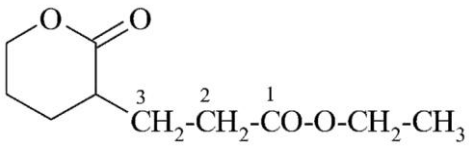
fenantro[1,10-*bc*:9,8-*b′,c′*]difurano-2,10-dion (PIN)
fenantreno-1,10:9,8-dikarbolakton

Laktony, jako pseudoketony posiadają niższą rangę niż kwasy lub estry, ale wyższą niż alkohole, aminy czy iminy.

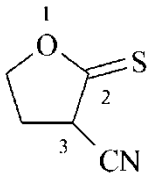
Przykłady:



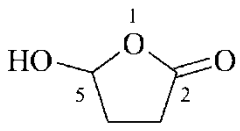
kwas 8-okso-7-oksabicyklo[4.2.0]oktano-4,5-dikarboksylowy (PIN)
kwas 2-oksoheksahydro-2*H*-benzookseto-5,6-dikarboksylowy
(preferowana nomenklatura skondensowana wymaga podania miejsca skondensowania i obecności minimum dwóch pierścieni pięcioczłonowych, zobacz P-52.2.4.1)



3-(2-oksooksan-3-ylo)propanian etylu (PIN)
3-(2-okso-3,4,5,6-tetrahydro-2*H*-piran-3-ylo)propanian etylu
(nazwy nasyconych pierścieni metodą Hantzscha-Widmana są preferowane w stosunku do nazw zwyczajowych związków uwodornionych, zobacz P-54.4.2)



2-sulfanylidenooksolano-3-karbonitryl (PIN)



5-hydroksyoksolan-2-on (PIN)

P-65.6.3.5.2 Sultony i sultiny są odpowiednio wewnątrzcząsteczkowymi estrami kwasów hydroksysulfonowych i hydroksysulfinowych i mogą być nazywane trzema metodami:

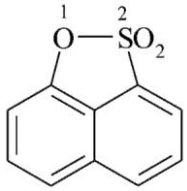
(1) jako heterocykliczne heterony, dodając do nazwy heterocyklicznego macierzystego wodorku przyrostek ‘on’, ‘dion’, ‘trion’, etc. wraz odpowiednimi przedrostkami zwielokrotniającymi;

(2) Wymieniając po nazwie odpowiedniego macierzystego wodorku określenie ‘sulton’ lub ‘sultin’oznaczające grupę –O-SO_2- lub –O-SO- w pierścieniu lub układzie cyklicznym, poprzedzone parą lokantów wskazujących miejsca przyłączenia odpowiednio grupy sulfonowej lub sulfinowej i atomu tlenu; lokant grupy sulfonowej lub sulfinowej wymienia się jako pierwszy i jeżeli istnieje możliwość wyboru jest on niższy od lokantu atomu tlenu. Dwa lub więcej pierścieni sultonowych lub sultinowych wskazuje się za pomocą przedrostków zwielokrotniających i par lokantów oddzielonych dwukropkami.

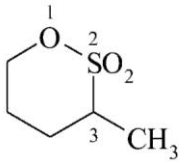
(3) Jako związki heterocykliczne, zgodnie z nomenklaturą klasowo-funkcyjną używając określenia ‘oksyd’.

Metoda (1) jest preferowana przez IUPAC

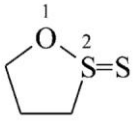
Przykłady:



2*H*-2λ^6-nafto[1,8-*cd*][1,2]oksatiolo-2,2-dion (PIN)
naftaleno-1,8-sulton
2,2-dioksyd nafto[1,8-*cd*][1,2]oksatiolu



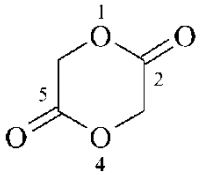
3-metylo-1,2λ^6-oksatiano-2,2-dion (PIN)
2,2-dioksyd 3-metylo-1,2-oksatianu
pentano-2,5-sulton



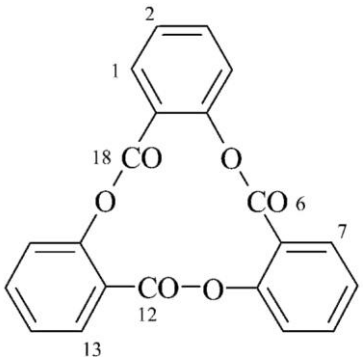
1,2λ^4-oksatiolano-2-tion (PIN)
2-tiooksyd 1,2-oksatiolanu

P-65.6.3.5.3 Laktydy są cyklicznymi estrami utworzonymi w wyniku wzajemnej estryfikacji dwu (lub więcej) cząsteczek hydroksykwasu; nazywa się je jak związki heterocykliczne.

Przykłady:

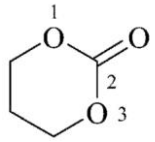


1,4-dioksano-2,5-dion (PIN)

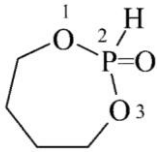


6*H*,12*H*,18*H*-tribenzo[*b*,*f*,*j*][1,5,9]trioksacyklododekano-6,12,18-trion (PIN)
(nie trisalicylid)

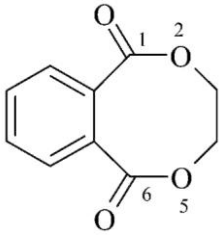
P-65.6.3.5.4 Inne cykliczne estry, pochodne różnych hydroksykwasów lub kwasów wielozasadowych i związków wielohydroksylowych nazywa się jak związki heterocykliczne.
Przykłady:



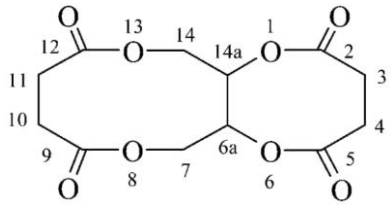
1,3-dioksan-2-on (PIN)



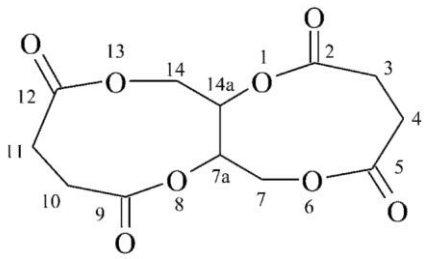
1,3,2λ^5-dioksafosfepan-2-on (PIN)



3,4-dihydro-2,5-benzodioksocyno-1,6-dion (PIN)
(nie 3,4-dihydrobenzo[*f*]dioksocyno-1,6-dion)



oktahydro[1,4]dioksocyno[2,3-c][1,6]dioksecyno-2,5,9,12-tetraon (PIN)

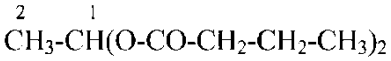


oktahydro[1,5]dioksonino[3,2-b][1,5]dioksonino-2,5,9,12-tetraon (PIN)

P-65.6.3.6 Acylale

Acylale są klasą związków o ogólnych wzorach R-CH(O-CO-R′)$_2$, RR′C(OCOR′′)$_2$, etc. Związki tego typu nazywa się jak estry.

Przykład:



dibutanian etano-1,1-diylu (PIN)
(tradycyjnie dibutanian etylidenu)

P-65.7 ANHYDRYDY(BEZWODNIKI) I ICH ANALOGI

P-65.7.0 Wprowadzenie
P-65.7.1 Symetryczne anhydrydy
P-65.7.2 Niesymetryczne (mieszane) anhydrydy
P-65.7.3 Tioanhydrydy i inne chalkogenowe analogi
P-65.7.4 Peroksyanhydrydy i chalkogenowe analogi
P-65.7.5 Pochodne diacylowe trioksydanu i chalkogenowe analogi
P-65.7.6 Di- i polianhydrydy
P-65.7.7 Cykliczne anhydrydy
P-65.7.5 Polifunkcyjne anhydryty

P-65.7.0 Wprowadzenie

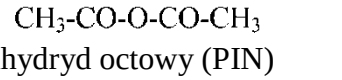
Anhydrydy są związkami składającymi się z dwóch grup acylowych związanych z tym samym atomem tlenu, to znaczy acyl-O-acyl. Symetryczne i niesymetryczne (mieszane) anhydrydy mają odpowiednio identyczne i różne grupy acylowe. Centralny atom tlenu może być zastąpiony atomem chalkogenu lub grupą peroksy i i ich chalkogenowymi analogami.

Opisane będą też polianhydrydy i polifunkcyjne anhydrydy.

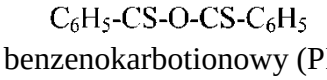
P-65.7.1 Symetryczne anhydrydy

Symetryczne anhydrydy monozasadowych kwasów, podstawione i niepodstawione, nazywa się zastępując słowo ‘kwas’ w nazwie kwasu przez nazwę klasy funkcyjnej ‘anhydryd’.

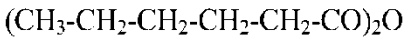
Przykłady:



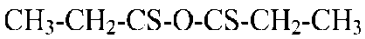
anhydryd octowy (PIN)



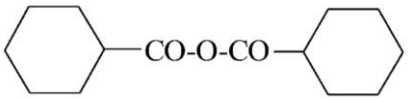
anhydryd benzenokarbotionowy (PIN)
anhydryd tiobenzoesowy



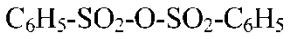
anhydryd heksanowy (PIN)



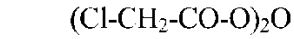
anhydryd tiopropionowy (PIN)



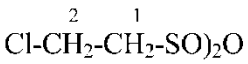
anhydryd cykloheksanokarboksylowy (PIN)



anhydryd benzenosulfonowy (PIN)



anhydryd chlorooctowy

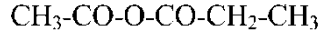


anhydryd 2-chloroetano-1-sulfinowy

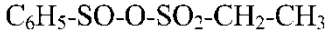
P-65.7.2 Mieszane anhydrydy

Anhydrydy utworzone z różnych monozasadowych kwasów, podstawionych i niepodstawionych, nazywa się wymieniając po nazwie ‘anhydryd’, stanowiącej oddzielne słowo, połączone łącznikiem nazwy obu kwasów w kolejności alfabetycznej.

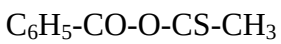
Przykłady:



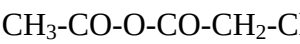
anhydryd octowo-propionowy (PIN)



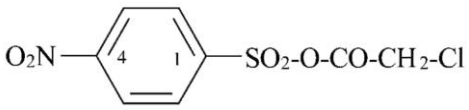
anhydryd benzenosulfinowo-etanosulfonowy (PIN)



anhydryd benzoesowo-etanotiowy (PIN)
anhydryd benzoesowo-tiooctowy



anhydryd chlorooctowo-octowy (PIN



anhydryd chlorooctowo-4-nitrobenzenosulfonowy

Mieszane anhydrydy kwasu karbonowego, cyjanowego i kwasów nieorganicznych nazywa się jako anhydrydy. Określenia takie jak ‘mono-, di-, tri-, tetraanhydryd’ stosuje się w kwasach wielozasadowych aby określić odpowiednią liczbę ugrupowań bezwodnikowych.

Przykłady:

CH_3-CO-O-CN

anhydryd cyjanowo-octowy (PIN)

C_6H_5-CO-O-PH_2

anhydryd benzoesowo-fosfinowy (PIN)

HO-BH-O-CO-CH_3

monoanhydryd borowo-octowy

P-65.7.3 Tioanhydryd i i inne chalkogenowe analogi

Chalkogenowe analogi anhydrydów o ogólnych strukturach –CO-X-CO-, -CO-X-CS- lub –CS-X-CS-, w których X jest –S-, -Se- lub –Te-, nazywa się stosując nazwę klasy ‘tioanhydryd’, ‘selenoanhydryd’ lub ‘telluroanhydryd’.

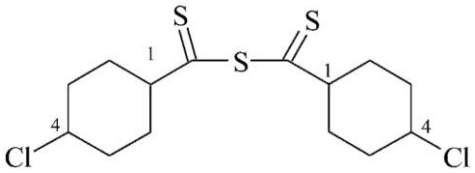
Przykłady:

C_6H_5-CO-S-CO-C_6H_5 tioanhydryd benzoesowy (PIN)

CH_3-CH_2-SO_2-S-CS-C_6H_5

tioanhydryd benzenokarbotionowo-etanosulfonowy (PIN)

tioanhydryd etanosulfonowo-tiobenzoesowy



tioanhydryd 4-chlorocykloheksano-1-karbotiowy (PIN)

CH_3-CO-Se-CO-CH_3 selenoanhydryd octowy (PIN)

Nazwy różnych niesymetrycznych tioanhydrydów pochodnych anhydrydu octowo-propionowego są następujące.

CH_3-CO-O-CO-CH_2-CH_3

anhydryd octowo-propanowy (PIN)
anhydryd octowo-propionowy

CH_3-CO-O-CS-CH_2-CH_3

anhydryd octowo-propanotiowy (PIN)
anhydryd octowo-tiopropionowy

CH_3-CO-S-CO-CH_2-CH_3

tioanhydryd octowo-propanowy (PIN)
tioanhydryd octowo-propionowy

CH_3-CS-O-CO-CH_2-CH_3

anhydryd etanotiowo-propanowy (PIN)
anhydryd propionowo-tiooctowy

CH_3-CS-O-CS-CH_2-CH_3	anhydryd etanotiowo-propanotiowy (PIN) anhydryd tioctowo-tiopropionowy
CH_3-CS-S-CS-CH_2-CH_3	tioanhydryd tioetanowo-tiopropanowy (PIN) tioanhydryd tiooctowo-tiopropionowy
CH_3-CH_2-CS-Se-CO-CH_3	selenoanhydryd octowo-tiopropanowy (PIN) selenoanhydryd octowo-tiopropionowy
CH_3-CS-S-CO-CH_2-CH_3	tioanhydryd etanotiowo-propanowy (PIN) tioanhydryd propionowo-tiooctowy

P-65.7.4 Peroksyanhydrydy i chalkogenowe analogi

Peroksyanhydrydy, R-CO-OO-CO-R lub R-CO-OO-CO-R′, nazywa się zastępując słowo ‘kwas’ w nazwie kwasu, lub dwóch różnych kwasów, przez nazwę grupy ‘peroksyanhydryd’.

Przykład:

CH_3-CO-OO-CO-CH_3

peroksyanhydryd octowy (PIN)

Pokrewne anhydrydy, w których połączenie pomiędzy dwoma grupami acylowymi jest typu –SS-, -OS-, -SSe-, etc. nazywa się jako ‘ditioperoksyanhydryd’, ‘tioperoksyanhydryd’, ‘selenotioperoksyanhydryd’, etc. Kiedy jest to konieczne, dla wskazania pozycji atomów chalkonu pomiędzy dwiema niesymetrycznie podstawionymi grupami acylowymi lub dwiema różnymi grupami acylowymi, nazwę grupy acylowej t poprzedza się pisanym kursywą symbolem właściwego pierwiastka.

Przykłady:

CH_3-CO-S-O-CO-CH_3 tioperoksyanhydryd octowy	CH_3-CO-S-O-CO-CH_2-CH_3 tioperoksyanhydryd *S*-octowo-*O*-propanowy (PIN)
CH_3-CO-SS-CO-CH_3	ditioperoksyanhydryd octowy

Pochodne diacylowe trioksydanu i chalkogenowe analogi

Anhydrydy utworzone z nadtlenokwasów i ich chalkogenowe analogi nazywa się podstawnikowo jako pseudoketony (zobacz P-64.3). Nazwy multiplikacyjne są preferowane , kiedy spełnione są warunki dla ich użycia (zobacz P-15.3).

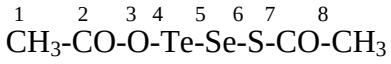
Przykłady:

CH_3-$\overset{1''}{C}$O-OOO-$\overset{1}{C}$O-CH_3	CH_3-$\overset{1}{C}$O-SSSS-$\overset{1}{C}$O-$\overset{2}{C}H_2$-$\overset{3}{C}H_3$
1,1′-(trioksydanodiylo)di(etan-1-on) (PIN)	1-(acetylotetrasulfanylo)propan-1-on (PIN)

CH_3-CO-S-O-S-CO-CH_3 1,1′-(ditiooksanodiylo)di(etan-1-on) (PIN)

CH_3-CO-OO-S-CO-CH_3 1-[(acetyloperoksy)sulfanylo]etan-1-on (PIN)
{nie 1-[(acetylosulfanylo)peroksy)]etan-1-on;
Preferowana nazwa (PIN) posiada niższe wskaźniki alfanumeryczne}

P-65.7.5.2 Diacylowe pochodne wieloatomowych łańcuchowych chalkogenów nazywa się stosując nazwy zamienne szkieletu (nomenklatura ‘a’), o ile są spełnione warunki dla ich użycia (zobacz P-15.4 i P-51.3.1).



3-oksa-6-tia-5-selena-4-telluraoktano-2,7-dion (PIN)

P-65.7.6 Di- i polianhydrydy

Di- i polianhydrydy posiadają odpowiednio dwie i więcej jednostek –CO-O-CO- lub podobnych grup, jak na przykład –SO_2-O-SO_2-. Takie związki nazywa się stosując funkcyjną nazwę klasy ‘dianhydryd’, ‘trianhydryd’, etc., stanowiącą oddzielne słowo poprzedzające połączone łącznikiem nazwy grup kwasowych.

P-65.7.6.1 Dianhydrydy nazywa się wymieniając po funkcyjnej nazwie klasy ‘dianhydryd’ połączone łącznikiem nazwy kwasów w kolejności ich występowania w strukturze, zaczynając od końcowego kwasu określonego pierwszeństwem alfabetycznym. Przedrostek liczbowy ‘di’ jest używany do tworzenia nazw preferowanych przez IUPAC.

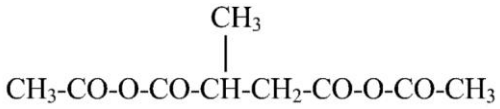
Przykłady:

$HO\text{-}B(O\text{-}CO\text{-}CH_3)_2$ dianhydryd borowo-octowy (PIN)

CH_3-CO-O-CO-CH_2-CH_2-CO-O-CO-CH_3 dianhydryd butanodiowo-dioctowy (PIN)

CH_3-CO-O-SO_2-CH_2-SO_2-O-CO-CH_2-CH_3
dianhydryd octowo-metanodisulfonowo-propanowy (PIN)

CH_3-CH_2-CO-O-CO-CH_2-CH_2-CO-O-CO-CH_2-CH_2-CH_3
dianhydryd butanowo-butanodiowo-propanowy (PIN)



dianhydryd dioctowo-2-metylobutanodiowy (PIN)

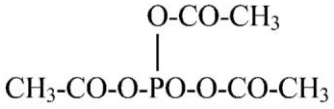
P-65.7.6.2 Liniowe polianhydrydy nazywa się jedną z następujących metod:

(1) wybierając preferowany kwas dikarboksylowy i wymieniając przyległe grupy kwasowe, z których jedna będzie podstawnikiem utworzonym zgodnie z zasadami nomenklatury podstawnikowej;
(2) wymieniając, po funkcyjnej nazwie klasy ‘dianhydryd’, ‘trianhydryd’, etc., połączone łącznikiem nazwy ugrupowań kwasowych w kolejności ich występowania w strukturze, zaczynając od końcowego kwasu określonego pierwszeństwem alfabetycznym. Przedrostki zwielokrotniające są nazwach preferowanych w przez IUPAC.

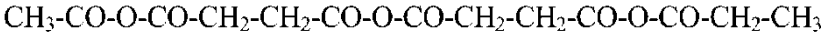
Jeżeli jest to konieczne, do określenia alfabetycznego pierwszeństwa porównuje się drugie od końca pary ugrupowań kwasowych.

Metoda (1) tworzenia nazw jest preferowana przez IUPAC.

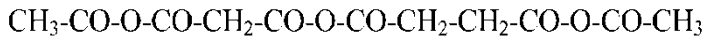
Przykłady:



trianhydryd trioctowo-fosforowy



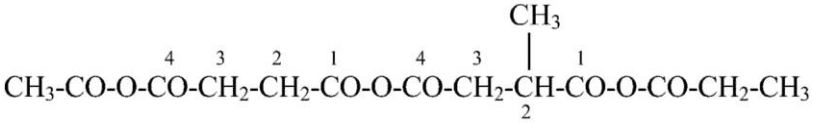
(1) dianhydryd octowo-butanodiowo-4-(propanoiloksy)-4-oksobutanowy (PIN)
(2) trianhydryd octowo-dibutanodiowo-propanowy



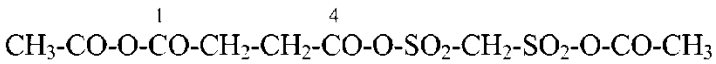
(1) dianhydryd 3-(acetyloksy)-3-oksopropanowo-butanodiowo-octowy (PIN)
(2) trianhydryd octowo-butanodiowo-propanodiowo-octowy

Kiedy dwuzasadowy kwas jest podstawiony, stosuje się lokanty do umiejscowienia końcowych ugrupowań kwasowych.

Przykłady:



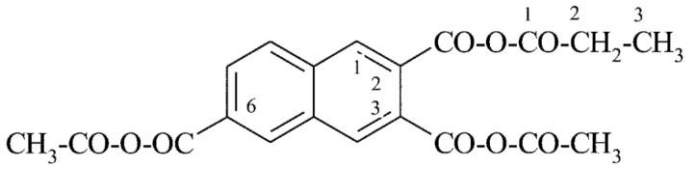
dianhydryd 4-[4-(acetyloksy)-4-oksobutanowo]-2-metylobutanodiowo-1-propanowy (PIN)
tribezwodnik 4-(octowo-butanodiowo)-2-metylobutanodiowo-1-propanowy



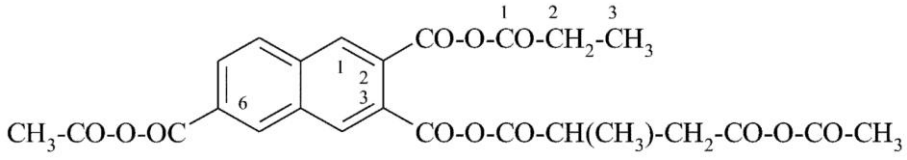
dianhydryd octowo-butanodiowo-[(acetyloksy)sulfonylo]metanosulfonowy (PIN)
trianhydryd octowo-butanodiowo-metanodisulfonowo-octowy

P-65.7.6.3 Polianhydrydy składające się z reszty wielozasadowego kwasu i równoważnej liczby reszt kwasów mozasadowych, nazywa się wymieniając w porządku alfabetycznym, po funkcyjnej nazwie klasy ‘anhydryd’ z odpowiednim przedrostkiem zwielokrotniającym, monozasadowe grupy

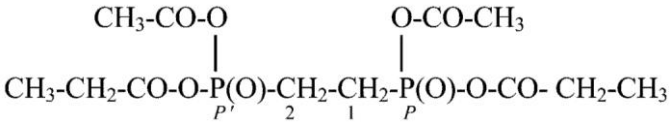
kwasowe, które mogą być podstawione przez dodatkowe wiązania bezwodnikowe. Lokanty mogą być użyte w celu uściślenia pozycji wiązań bezwodnikowych.



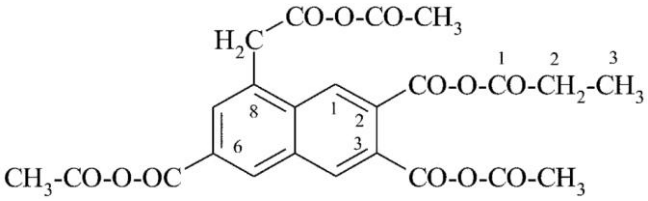
trianhydryd 3,6-dioctowo-2-propanowo-naftaleno-2,3,6-trikarboksylowy (PIN)



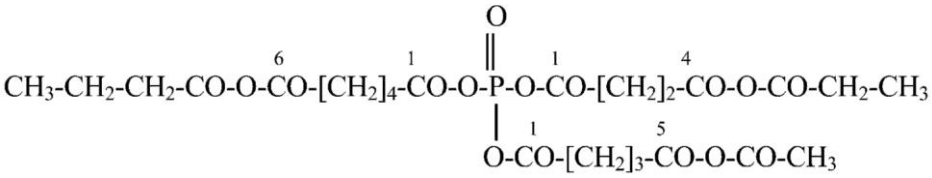
trianhydryd 3-[4-(acetyloksy)-4-okso]-2-metylobutanowo-6-octowo-2-propanowo naftaleno-2,3,6-trikarboksylowy (PIN)



tetraanhydryd *P*,*P*′-dioctowo-*P*,*P*′-dipropanowo-etano-1,2-diylobis(fosfonowy) (PIN)



triahydryd 3,6-dioctowo-2-propanowo-8-[2-(acetyloksy)-2-oksoetylo]naftaleno-2,3,6-trikarboksylowy (PIN)



trianhydryd 5-(acetyloksy)-5-oksopentanowo-6-(butanoiloksy)-6-oksoheptanowo-4-(propanyloksy)-4-oksobutanowo-fosforowy

P-65.7.6.4 Chalkogenowe analogi di- i polianhydrydów

Kiedy atomy chalkogenu są obecne w di- i polianhydrydach, ich nazwy tworzy się w różny sposób.

P-65.7.6.4.1 Kiedy wszystkie wiązania anhydrydowe są identyczne, jak –CO-S-CO-, nazwy tworzy się stosując funkcyjną nazwę klasy ‘tioanhydryd’ poprzedzoną przedrostkiem zwielokrotniającym ‘bis-‘, ‘tris-’, etc.

Przykłady:

CH_3-CO-S-CO-CH_2-CH_2-CO-S-CO-CH_3

bis(tioanhydryd) butanodiowo-octowy (PIN)

CH_3-CO-S-SO_2-CH_2-SO_2-S-CO-CH_3

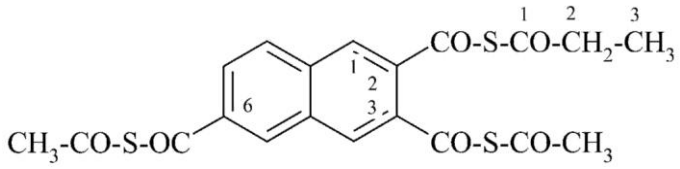
bis(tioanhydryd) dioctowo-metanodisulfonowy

P-65.7.6.4.2 Kiedy w ugrupowaniach anhydrydów obecne są różne atomy chalkogenów, do ustalenia starszeństwa grupy anhydrydowej stosuje się ustaloną kolejność starszeństwa atomów chalkogenów, O > S > Se > Te. Wybrany najstarszy anhydryd stanowiący podstawę nazwy może być anhydrydem (zobacz P-65.7.1 do P-65.7.5) lub di- czy polianhydrydem. Inne ugrupowania anhydrydowe nazywa się podstawnikowo.

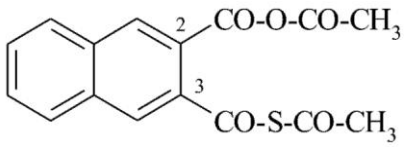
Przykłady:

CH_3-CO-O-CO-CH_2-CH_2-CH_2-CO-S-CO-CH_3

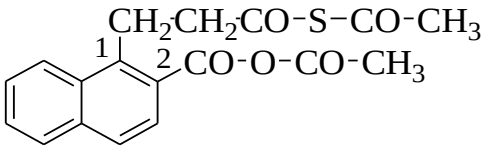
anhydryd 5-(acetylosulfanylo)-5-oksopentanowo-octowy (PIN)



tris(tioanhydryd) 3,6-dioctowo-2-propanowo-naftaleno-2,3,6-trikarboksylowy (PIN)



anhydryd 3-[(acetylosulfanylo)karbonylo]naftaleno-2-karboksylowo-octowy (PIN)



anhydryd 1-[3-(acetylosulfanylo)-3-oksopropanylo]naftaleno-2-karboksylowo-octowy (PIN)

P-65.7.6.4.3 Kiedy atom chalkogenu zastępuje atom tlenu grupy karbonylowej, to jest >C=S, kwasy tiokarboksylowe i grupy tioacylowe stosuje się w sposób opisany dla anhydrydów i polianhydrydów.

Przykład:

CH_3-CS-CO-CH_2-CH_2-CO-O-CO-CH_3

dianhydryd etanotiowo-butanodiowo-octowy (PIN)

CH_3-CO-O-CS-CH_2-CH_2-CS-O-CO-CH_3

dianhydryd dioctowo-butanobis(tiowy) (PIN)

CH_3-CO-O-CS-CH_2-CH_2-CS-S-CS-CH_3

anhydryd 4-[(etanotioilo)sulfanylo]-4-sulfanylidenobutanotiowo-octowy (PIN)

CH_3-CO-O-CO-CH_2-CH_2-CO-O-CO-CH_2-CH_2-CO-S-CO-CH_2-CH_3

anhydryd octowo-butanediowo-4-oxo-4-(propanoilosulfanylo)butanowy (PIN)

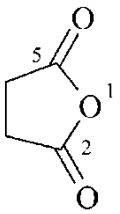
P-65.7.7 Cykliczne anhydrydy

P-65.7.7.1 Cykliczne anhydrydy utworzone z dwóch grup kwasowych powiązanych z tym samym macierzystym wodorkiem nazywa się na dwa sposoby:

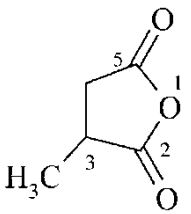
(1) jako heterocykliczne pseudoketony;
(2) zmieniając funkcyjną nazwę klasy ‘kwas’ na ‘bezwodnik’ w nazwie systematycznej lub zwyczajowej dwuzasadowego kwasu.

Metoda (1) tworzenia nazw jest preferowana przez IUPAC.

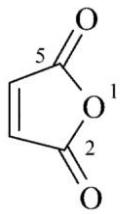
Przykłady:



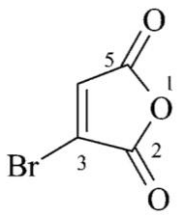
oksolano-2,5-dion (PIN)
3,4-dihydrofurano-2,5-dion
anhydryd butanodiowy
anhydryd bursztynowy



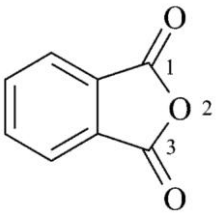
3-metylooksolano-2,5-dion (PIN)
3-metylo-3,4-dihydrofurano-2,5-dion
anhydryd 2-metylobutanodiowy
anhydryd metylobursztynowy



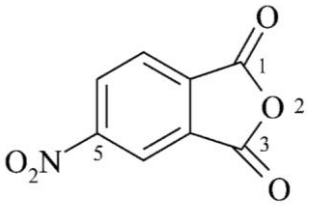
furano-2,5-dion (PIN)
anhydryd maleinowy



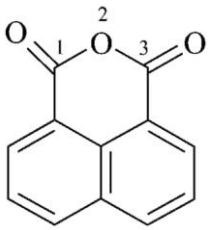
3-bromofurano-2,5-dion (PIN)
anhydryd bromomaleinowy



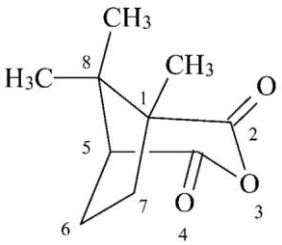
2-benzofurano-1,3-dion (PIN)
izobenzofurano-1,3-dion
anhydryd ftalowy



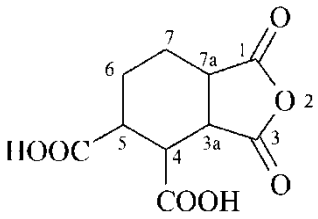
5-nitro-2-benzofurano-1,3-dion (PIN)
5-nitroizobenzofurano-1,3-dion
anhydryd 4-nitroftalowy



1*H*,3*H*-benzo[*de*][2]benzopirano-1,3-dion (PIN)
1*H*,3*H*-benzo[*de*]izochromeno-1,3-dion (PIN)
anhydryd naftaleno-1,8-dikarboksylowy



1,8,8 trimetylo-3-oksabicyklo[3.2.1]oktano-2,4-dion (PIN)
(znany również jako anhydryd kamforowy)



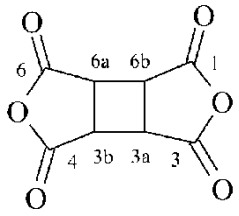
kwas 1,3-dioksooktahydro-2-benzofurano-4,5-dikarboksylowy (PIN)
kwas 1,3-dioksooktahydroizobenzofurano-4,5-dikarboksylowy
3,4-anhydryd kwasu cykloheksano-1,2,3,4-tetrakarboksylowego

P-65.7.7.2 Cykliczne dianhydrydy utworzone z czterech grup kwasowych powiązanych z tym samym macierzystym wodorkiem nazywa się na dwa sposoby:

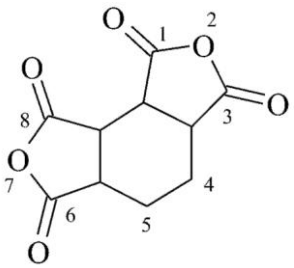
(1) jako heterocykliczne pseudoketony;
(2) zmieniając funkcyjną nazwę klasy ‘kwas’ na ‘anhydryd’ w nazwie systematycznej lub zwyczajowej czterozasadowego kwasu; lokanty par grup kwasowych tworzących bezwodnik rozdziela się dwukropkiem.

Metoda (1) tworzenia nazw jest preferowana przez IUPAC.

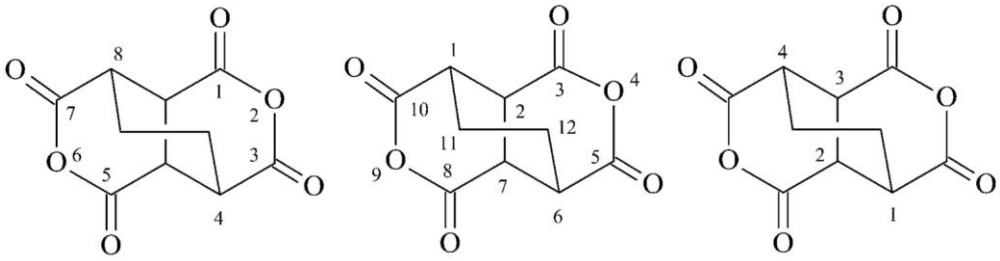
Przykłady:



tetrahydrocyklobuta[1,2-c:3,4-c']difurano-1,3,4,6-tetraon (PIN)
1,2:3,4-dianhydryd cyklobutano-1,2,3,4-tetrakarboksylowy



heksahydrobenzo[1,2-c:3,4-c′]difurano-1,3,6,8-tetraon (PIN)
1,2:3,4-dianhydryd cykloheksano-1,2,3,4-tetrakarboksylowy



(I) **(II)** **(III)**

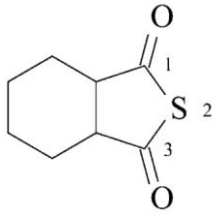
tetrahydro-4,8-etanopirano[4,3-c]pirano-1,3,5,7-tetraon (PIN)
[numerację pokazuje wzór **(I)**]
(nie 4,9-dioksatricyklo[4.4.2.0^{2,7}]dodekano-3,5,8,10-tetraon)
[numerację pokazuje wzór **(II)**]
1,3:2,4-dianhydryd cykloheksano-1,2,3,4-tetrakarboksylowy
[numerację pokazuje wzór **(III)**]

P-65.7.7.3 Chalkogenowe analogi cyklicznych anhydrydów nazywa się:

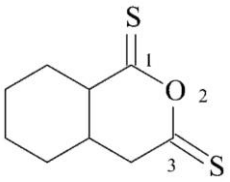
(1) jako heterocykliczne pseudoketony;
(2) zmieniając funkcyjną nazwę klasy 'kwas' na 'dianhydryd' lub 'tioanhydryd', 'tiodianhydryd', etc., w nazwie systematycznej lub zwyczajowej dwuzasadowych lub czterozasadowych kwasów.

Metoda (1) tworzenia nazw jest preferowana przez IUPAC.

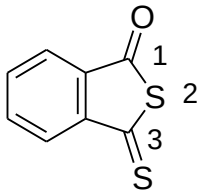
Przykłady:



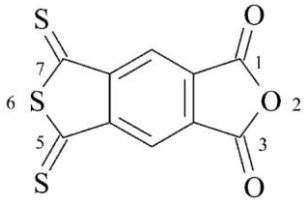
(1) heksahydro-1*H*-2-benzotiofeno-1,3(4*H*)-dion (PIN)
heksahydro-1*H*-benzo[c]tiofeno-1,3(4*H*)-dion
(2) tioanhydryd cykloheksano-1,2-dikarboksylowy
tioanhydryd heksahydroftalowy



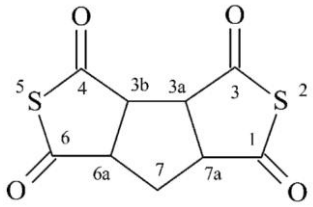
(1) heksahydro-1*H*-benzopirano-1,3(4*H*)-dition (PIN)



(1) 3-sulfanylideno-2-benzotiofen-1(3*H*)-on (PIN)
3-sulfanylidenobenzo[c]tiofen-1(3*H*)-on



(1) 5,7-disulfanylideno-5,7-dihydro-1*H*,3*H*-tieno[3,4-*f*][2]benzofurano-1,3-dion (PIN)
5,7-ditiokso-5,7-dihydro-1*H*,3*H*-tieno[3,4-*f*]izobenzofurano-1,3-dion
(2) anhydryd 2-benzotiofeno-5,6-dikarboksylowy
anhydryd izobenzotiofurano-5,6-dikarboksylowy



(1) 3b,6a,7,7a-tetrahydro-1*H*-cyklopenta[1,2-c:3,4-c′]ditiofeno-1,3,4,6(3a*H*)-tetraon (PIN)
(2) 1,2:3:4-ditioanhydryd cyklopentano-1,2,3,4-tetrakarboksylowy

P-65.7.8 Polifunkcyjne anhydrydy

Anhydrydy podstawionych kwasów monokarboksylowych i monosulfonowych, jeżeli są symetrycznie podstawione, nazywa się dodając przedrostek ‘bis’ do nazwy kwasu i zmienia funkcyjną nazwę klasy ‘kwas’ na ‘anhydryd’. Przedrostek ‘bis’ może być pominięty w nomenklaturze ogólnej.

Przykłady:

$(Cl\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}SO)_2O$	$(Cl\text{-}CH_2\text{-}CO)_2O$
anhydryd bis(2-chloroetanosulfonowy)	anhydryd bis(chlorooctowy)
$(H_2N\text{-}[CH_2]_5\text{-}CO)_2O$	anhydryd bis(6-aminoheksanowy)

P-65.7.8.2 Niesymetrycznie podstawione anhydrydy kwasów karboksylowych i kwasów sulfonowych nazywa się jak mieszane anhydrydy, co omówiono w P-65.7.2.

Przykłady:

$Cl\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}CO\text{-}O\text{-}CO\text{-}CHCl\text{-}CH_3$

anhydryd 2-chloropropanowo-3-chloropropanowy

$Cl\text{-}CH_2\text{-}CO\text{-}O\text{-}CS\text{-}CH_2\text{-}Cl$

anhydryd chloroetanotiowo-chlorooctowy

P-66 AMIDY, IMIDY,HYDRAZYDY, NITRYLE I ALDEHYDY

P-66.0 Wprowadzenie
P-66.1 Amidy
P-66.2 Imidy
P-66.3 Hydrazydy
P-66.4 Amidyny, amidrazony, hydrazydyny i amidooksymy (oksymy amidów)
P-66.5 Nitryle
P-66.6 Aldehydy

P-66.0 Wprowadzenie

Klasy związków rozpatrywane w tej sekcji mają wspólną cechę, ich nazwy zwyczajowe są pochodnymi nazw grupy acylowej kwasów, w których końcówkę ‘oil’ (‘yl’) zastępuje klasa np. ‘amid’, ‘ohydrazyd’, ‘nitryl’ czy ‘aldehyd’. Ich nazwy systematyczne tworzy się podstawnikowo stosując jeden z dwóch typów przyrostków, pierwszy obejmuje atom węgla, np. ‘karbonitryl’ dla –CN, drugi nie, np. ‘-nitryl’ dla –(C)N. Amidyny nazywa się jako amidy, hydrazydyny jako hydrazydy i amidrazony jako amidy lub hydrazydy.

P-66.1 Amidy

P-66.1.0 Wprowadzenie
P-66.1.1 Pierwszorzędowe amidy
P-66.1.2 Drugorzędowe i trzeciorzędowe amidy
P-66.1.3 ‘Ukryte’ amidy

P-66.1.4 Chalkogenowe analogi amidów
P-66.1.5 Laktamy, laktimy, sultamy i sultimy
P-66.1.6 Amidy utworzone z kwasu karbonowego, cyjanowego i kwasów di- i polikarbonowych
P-66.1.7 Wielofunkcyjne amidy

P-66.1.0 Wprowadzenie

Amidy są pochodnymi organicznych kwasów tlenowych, w których każda grupa hydroksylowa została zastąpiona przez grupę aminową lub podstawioną grupę aminową. Zastąpione chalkogenem analogi amidów są określane jako tio-, seleno- i telluroamidy. Związki posiadające jedną, dwie lub trzy grupy acylowe przy tym samym atomie azotu są również tutaj włączone i określane odpowiednio jako pierwszorzędowe, drugorzędowe i trzeciorzędowe amidy.

P-66.1.1 Pierwszorzędowe amidy

P-66.1.1.1 Karboksyamidy
P-66.1.1.2 Sulfonoamidy, sulfinoamidy i pokrewne selenowe i tellurowe amidy
P-66.1.1.3 Podstawienie pierwszorzędowych amidów
P-66.1.1.4 Amidy wskazane przedrostkami

P-66.1.1.1 Karboksyamidy

Nazwy karboksyamidów tworzy się na dwa sposoby:

P-66.1.1.1.1 Nomenklaturą podstawnikową
P-66.1.1.1.2 Modyfikując nazwy zwyczajowe kwasów

P-66.1.1.1 Nazwy amidów tworzone zgodnie z nomenklaturą podstawnikową

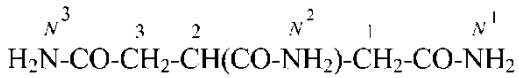
P-66.1.1.1.1.1 Alicykliczne mono- i diamidy nazywa się podstawnikowo dodając przyrostek ‘amid’ do nazwy odpowiedniego macierzystego wodorku. Przedrostek zwielokrotniający ‘di’ jest używany do tworzenia nazw diamidów.

Przykłady:

heksanoamid (PIN) pentanodiamid (PIN)

P-66.1.1.1.1.2 Jeżeli nierozgałęziony łańcuch jest bezpośrednio związany z więcej niż dwiema grupami –CO-NH_2, nazwę tworzy się dodając przyrostek ‘karboksyamid’ do nazwy macierzystego wodorku.

Przykład:



propano-1,2,3-trikarboksyamid (PIN)

P-66.1.1.1.1.3 Przyrostek ‘karboksyamid’ jest również stosowany w nazwach amidów, w których grupa -CO-NH_2 jest połączona z pierścieniem, układem pierścieni i heterocyklicznym wodorkiem macierzystym.

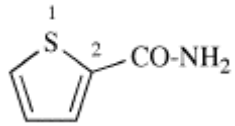
Przykłady:

H_2P-CO-NH_2

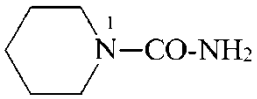
fosfanokarboksyamid (PIN)

H_2N-NH-CO-NH_2

hydrazynokarboksyamid (PIN)



tiofeno-2-karboksyamid (PIN)



piperydyno-1-karboksyamid (PIN)

P-66.1.1.1.2 Nazwy amidów utworzone w wyniku modyfikacji nazw zachowanych kwasów

Nazwy amidowych pochodnych kwasów karboksylowych wymienionych w P-65.1.1 tworzy się zamieniając ‘-oil’ (‘-yl/il’) w nazwie grupy acylowej na ‘amid’. Nazwy amidów utworzone tą metodą są preferowanymi nazwami IUPAC i nazwami stosowanymi w nomenklaturze ogólnej zgodnie z statusem odpowiedniego kwasu; struktury mogą być podstawione w ten sam sposób jak pokazano dla odpowiednich kwasów (zobacz P-65.1.1).

P-66.1.1.1.2.1 Tylko następujące cztery nazwy zwyczajowe amidów są preferowanymi nazwami IUPAC i mogą być podstawione. W nazwie ‘oksamid’ będącej skróconą formą od ‘oksalamid’ dozwolone jest podstawienie atomu azotu.

CH_3-CO-NH_2

acetamid (PIN)

C_6H_5-CO-NH_2

benzamid (PIN)

NH_2-CO-CO-NH_2

oksamid (PIN)

NC-NH_2

cyjanamid (PIN, zobacz P-66.1.6.2)

P-66.1.1.1.2.2 Tradycyjna nazwa ‘formamid’ jest zachowana dla HCO-NH_2 i jest preferowana przez IUPAC. Dozwolone jest podstawienie grupy –NH_2. Podstawienie aldehydowego atomu wodoru podlega ograniczeniom (zobacz P-65.1.8).

Przykłady:

HCO-NH_2

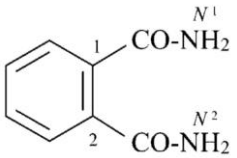
formamid (PIN)

Cl-CO-NH_2

amid karbonochlorydowy (PIN)
(nie 1-chloroformamid)

P-66.1.1.1.2.3 W ogólnej nomenklaturze, tylko nazwy furanoamid, ftaloamid, izoftaloamid i tereftaloamid mogą być podstawione (zobacz P-65.1.1.2.1). Nazwy systematyczne utworzone zgodnie z P-65.1.2 są preferowane przez IUPAC.
Tylko w nazwach: acetamid, benzamid, cyjanamid, formamid, oksamid, nie dodaje się eufonicznego ‘o’ przed końcówkę ‘amid’

Przykłady:

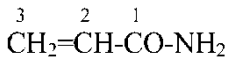


benzeno-1,2-dikarboksyamid (PIN)
ftaloamid

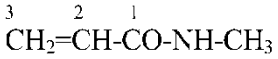
benzeno-1,4-dikarboksyamid (PIN)
tereftaloamid

P-66.1.1.1.2.4 W nazewnictwie ogólnym, stosuje się tylko nazwy amidów utworzonych z kwasów o nazwach zwyczajowych podanych w P-65.1.1.2; podstawienie jest niedozwolone nawet na atomach azotu. Preferowane przez IUPAC są nazwy systematyczne, jak podano w P-65.1.2.

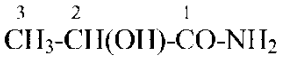
Przykłady:



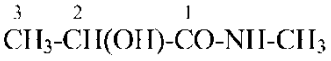
prop-2-enoamid (PIN)
akryloamid



N-metyloprop-2-enoamid (PIN)
(nie *N*-metyloakryloamid; podstawienie jest niedozwolone w akryloamidzie)



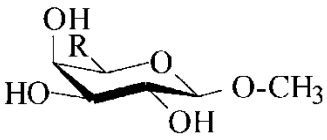
2-hydroksypropanoamid (PIN)
laktamid



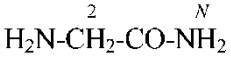
2-hydroksy-*N*-metylopropanoamid (PIN)
(nie *N*-metylolaktoamid)

P-66.1.1.1.2.5 Nazwy amidowych pochodnych kwasów węglowodanowych (cukrowych) i α-aminokwasów są omówione, odpowiednio, w P-102.5.6.6.2.1, P-102.5.6.6.5 i P-103.2.6.

Przykłady:



R = -CO-NH2
β-D-galaktopiranozydouronoamid metylu



2-aminoacetamid
glicynoamid

P-66.1.1.2 Sulfonoamidy, sulfinoamidy i pokrewne selenowe i tellurowe amidy

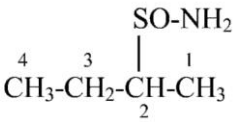
Sulfonoamidy, sulfinoamidy oraz selenowe i tellurowe analogi amidów nazywa się podstawnikowo stosując następujące przyrostki:

$-SO_2-NH_2$	sulfonoamid (preferowany przyrostek)
$-SO-NH_2$	sulfinoamid (preferowany przyrostek)
$-SeO_2-NH_2$	selenonoamid (preferowany przyrostek)
$-SeO-NH_2$	seleninoamid (preferowany przyrostek)
$-TeO_2-NH_2$	telluronoamid (preferowany przyrostek)
$-TeO-NH_2$	tellurynoamid (preferowany przyrostek)

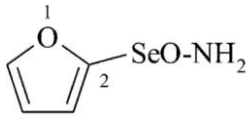
Te przyrostki mogą być przypisane do dowolnej pozycji macierzystego wodorku.

Przykłady:

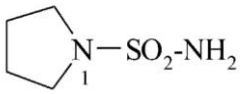
etanosulfonoamid (PIN)



butano-2-sulfonoamid (PINP



furano-2-seleninoamid (PIN)



pirolidyno-1-sulfonoamid (PIN)

P-66.1.1.3 Podstawione pierwszorzędowe amidy

P-66.1.1.3.1	*N*-Podstawienie
P-66.1.1.3.2	Kwasy hydroksamowe
P-66.1.1.3.3	Kwasy amowe
P-66.1.1.3.4	Anilidy
P-66.1.1.3.5	Ogólne podstawianie amidów

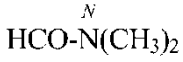
P.66.1.1.3.1 *N*-Podstawienie

P.66.1.1.3.1.1 Podstawione pierwszorzędowe amidy o ogólnych strukturach R-CO-NHR′ i R-CO-NR′R″, oraz ich odpowiednie amidowe pochodne kwasów chalkogenowych, nazywa się wymieniając podstawniki R′ i R″ jako przedrostki poprzedzone *N* lokantem, jeżeli w strukturze jest obecna jedna grupa amidowa. W di- i poliamidach, za wyjątkiem geminalnych diamidów, *N* lokanty uzupełnia się o pisane cyframi arabskimi w indeksie górnym wskaźnikami, które są lokantami macierzystej struktury, i różnicują atomy azotu, np. N^1,N'^1, etc. (zobacz również P-62.2.4.1.2). Zalecane *N* lokanty dla geminalnych diamidów są omówione w P-66.1.1.3.1.2.

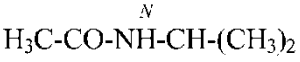
Cyfry arabskie w indeksie górnym są teraz używane do zróżnicowania atomów azotu diamidów, tam gdzie dawniej używano primy (′), podwójne primy (″), potrójne primy (‴), etc..

Tworzenie nazw *N*-podstawionych pierwszorzędowych amidów jest niedozwolone w przypadku gdy nazwa zwyczajowa określa niepodstawialny amid.

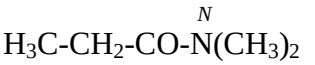
Przykłady:



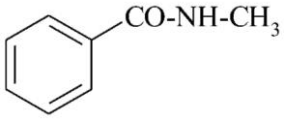
N,*N*-dimetyloformamid (PIN)
dimetyloformamid



N-(propan-2-yl)acetamid (PIN)

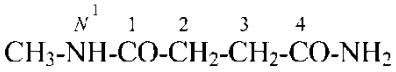


N,*N*-dimetylopropanoamid (PIN)
(nie *N*,*N*-dimetylopropionoamid;
podstawienie w nazwie zwyczjowej
propionoamid jest niedozwolone)

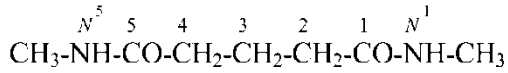


N-metylobenzamid (PIN)

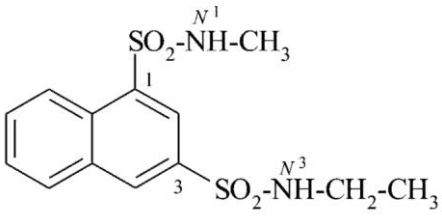
N,*N*-dietylofurano-2-karboksyamid (PIN)
N,*N*-dietylo-2-furanoamid



N^1-metylobutanodiamid (PIN)



N^1,N^5-dimetylopentanodiamid (PIN)

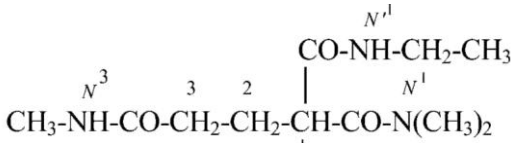


N^3-etylo-N^1-metylonaftaleno-1,3-disulfonoamid (PIN)

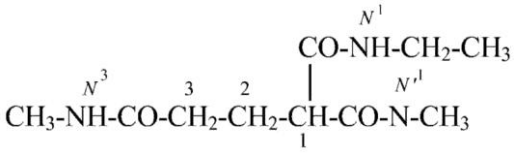
P-66.1.1.3.1.2 Lokanty dla geminalnych grup karboksyamidowych

Gdy występują geminalne grupy karboksyamidowe, lokanty *N*, *N′,* etc. są używane wspólnie z lokantami liczbowymi wskazującymi położenie grup w łańcuchu lub pierścieniu. Najniższe lokanty przypisuje się grupie najbardziej podstawionej; gdy isnieje wybór, najniższe lokanty przypisuje się *N*-podstawnikowi pierwszemu w porządku alfabetycznym.

Przykłady:



N′^{1}-etylo-*N*^{1},*N*^{1},*N*^{3}-trimetylopropano-1,1,3-trikarboksyamid (PIN)

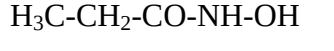


N′^{1}-etylo-*N*^{1},*N*^{3}-dimetylopropano-1,1,3-trikarboksyamid (PIN)

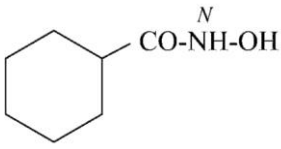
P-66.1.1.3.2 Kwasy hydroksamowe

Kwasy hydroksamowe mają ogólną strukturę R-CO-NH-OH i nazywa się je jako *N*-hydroksyamidy (zobacz P-65.1.3.4). Przyrostki ‘kwas hydroksamowy’ i ‘kwas karbohydroksamowy’ już nie są zalecane.

Przykłady:



N-hydroksypropanoamid (PIN)
(nie kwas propanohydroksamowy)

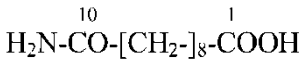


N-hydroksycykloheksanokarboksyamid (PIN)
(nie kwas cykloheksanokarbohydroksamowy)

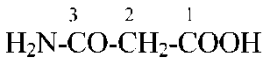
P-66.1.1.3.3 Kwasy amowe

Kwasy amowe są pochodnymi kwasów dikarboksylowych mających nazwę zwyczajową, w których jedna grupa karboksylowa została zastąpiona przez grupę karboksyamidową. Preferowane przez IUPAC nazwy kwasów amowych tworzy się metodą (1) z P-66.1.1.4.1.1. Kwasy amowe można nazywać również metodami (2) i (3) i przez zamianę końcówki ‘-owy’ w nazwie kwasu na ‘-amowy’(zobacz P-65.1.6.1).

Przykłady:



(1) kwas 10-amino-10-oksodekanowy (PIN)
(2) kwas 9-karbamoilononanowy
(3) kwas 9-(aminokarbonylo)nonanowy



(1) kwas 3-amino-3-oksopropanowy (PIN)
(2) kwas karbamoilooctowy
(3) kwas (aminokarbonylo)octowy
kwas malonoamowy (zobacz P-65.1.6.1)

P-66.1.1.3.4 Anilidy

N-Fenylowe pochodne pierwszorzędowych amidów zwane ‘anilidami’ można nazywać używając określenia ‘anilid’ zamiast ‘amid’ w systematycznej lub zwyczajowej nazwie amidów. Lokanty podstawników w pierścieniu *N*-fenylowym oznacza się cyframi primowanymi. Jednak nazwy wyrażające *N*-podstawienie amidu grupa fenylową są preferowane przez IUPAC.

Przykłady:

$HCO\text{-}NH\text{-}C_6H_5$

N-fenyloformamid (PIN)
formanilid

$CH_3\text{-}CO\text{-}NH\text{-}C_6H_5$

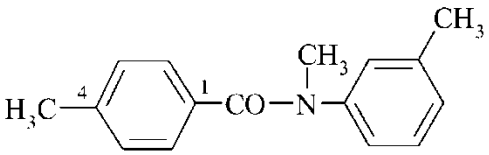
N-fenyloacetamid (PIN)
acetanilid

$CH_3\text{-}[CH_2]_4\text{-}CO\text{-}NH\text{-}C_6H_5$

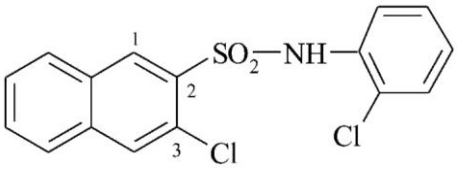
N-fenyloheksanoamid (PIN)
heksanoanilid

$C_6H_5\text{-}CO\text{-}N(CH_3)\text{-}C_6H_5$

N-metylo-*N*-fenylobenzamid (PIN)
N-metylobenzanilid



N,4-dimetylo-*N*-(3-metylofenylo)benzamid (PIN)
N,3′,4-trimetylobenzanilid



3-chloro-*N*-(2-chlorofenylo)naftaleno-2-sulfonoamid (PIN)
2′,3-dichloronaftaleno-2-sulfonanilid

P-66.1.1.3.5 Podstawienie amidów w ujęciu ogólnym

Podstawienie amidów wyraża się przedrostkami; jeśli jest to konieczne stosuje się lokanty liczbowe, i lokanty *N*- i *N*′-. Zasady *N*-podstawienia amidów są następstwem reguł podstawienia opisanych dla kwasów karboksylowych w P-65.1.1.2.

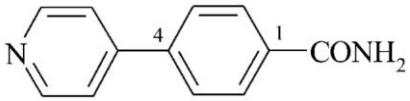
Przykłady:

$Cl\text{-}\overset{3}{C}H_2\text{-}\overset{2}{C}H_2\text{-}\overset{1}{C}O\text{-}NH_2$

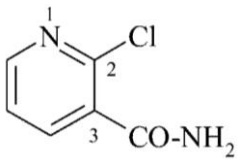
3-chloropropanoamid (PIN)
(nie 3-chloropropionoamid;
propionoamid tylko nie podstawiony)

$Cl\text{-}\overset{4}{C}H_3\text{-}\overset{3}{C}H_2\text{-}\overset{2}{C}H_2\text{-}\overset{1}{C}O\text{-}N(CH_3)_2$

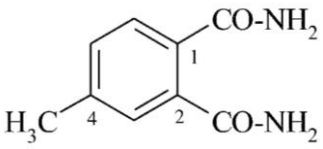
4-chloro-*N*,*N*-dimetylobutanoamid (PIN)
(nie 4-chloro-*N*,*N*-dimetylobutyryloamid;
butyroamid tylko niepodstawiony)



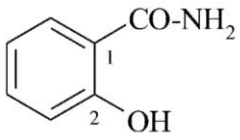
4-(pirydyn-4-ylo)benzamid (PIN)
4-(4-pirydylo)benzamid



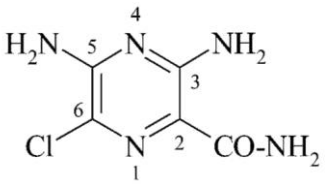
2-chloropirydyno-3-karboksyamid (PIN)
(nie 2-chloronikotynoamid)



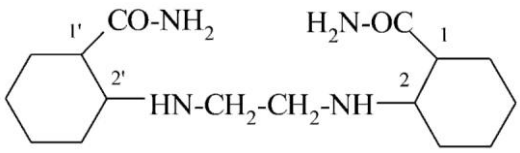
4-metylobenzeno-1,2-dikarboksyamid (PIN)
4-metyloftaloamid



2-hydroksybenzamid (PIN)
(nie salicyloamid)



3,5-diamino-6-chloropirazyno-2-karboksyamid (PIN)



[2,2′-etano-1,2-diylobis(azanodiylo)]di(cykloheksano-1-karboksyamid) (PIN)

P-66.1.1.4 Amidy wskazywane przedrostkami

W obecności grup charakterystycznych mających od amidów starszeństwo w określaniu przy pomocy przyrostka, dwie różne grupy podstawników mogą pochodzić od amidów wyrażanych przedrostkiem.

P-66.1.1.4.1 Podstawniki typów $–CO-NH_2$ i $–CO-CO-NH_2$

P-66.1.1.4.2 Podstawniki typów $–SO_2-NH_2$, $-SO-NH_2$ i ich selenowe i tellurowe analogi

P-66.1.1.4.3 Podstawniki typów –NH-COR i $–NH-SO_2-R$

P-66.1.1.4.4 Podstawniki R-CO-N< i R-CO-N=; lub $R-SO_2-N<$ i $R-SO_2-N=$ (i ich selenowe i tellurowe analogi)

P-66.1.1.4.2 Podstawione pochodne oksamidu, $H_2N-CO-CO-NH_2$

P-66.1.1.4.1 Podstawniki typów $–CO-NH_2$ i $–CO-CO-NH_2$

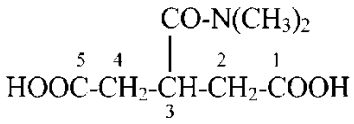
P-66.1.1.41.1 W przypadku obecności grup charakterystycznych mających pierwszeństwo do wymieniania w przyrostku albo kiedy nie wszystkie grupy karbamoilowe mogą być włączone do przyrostka, grupę -CO-NH_2 nazywa się na trzy różne sposoby:

(1) używając dwa przedrostki, 'amino' i 'okso', dla wskazania obecności takiej grupy na końcowym atomie łańcucha węglowego mającego więcej niż jeden atom węgla;

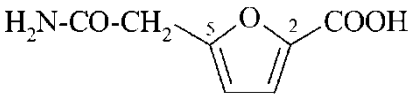
(2) używajac nazwę grupy acylowej: 'karbamoilo' (patrz P-65.2.1.5.);
(3) używajac przedrostek 'aminokarbonylo'.

Do tworzenia preferowanych nazw IUPAC (PIN), metoda (1) jest preferowana dla związków łańcuchowych, a metoda (2) dla pierścieni, układówpierścieni, łańcuchów heterogenicznych i w przypadku obecności podstawnika na nieterminalnych atomach łańcuchów węglowych. Grupy karbamoilowa i aminowa mogą być podstawione w zwykły sposób.

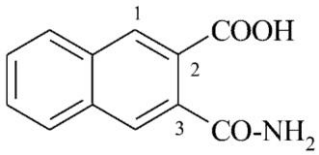
Przykłady:



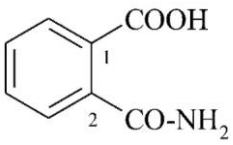
(2) kwas 3-(dimetylokarbamoilo)pentanodiowy (PIN)
(3) kwas 3-[(dimetyloamino)karbonylo]pentanodiowy



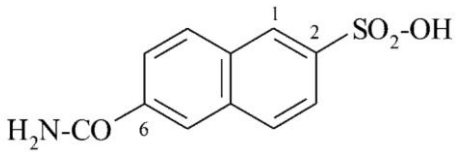
(1) kwas 5-(2-amino-2-oksoetylo)furano-2-karboksylowy (PIN)
(2) kwas 5-(karbamoilometylo)furano-2-karboksylowy
(3) kwas 5-[(aminokarbonylo)metylo]furano-2-karboksylowy



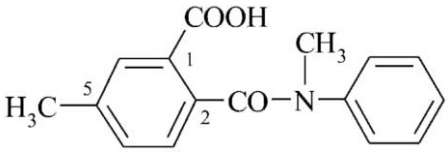
(2) kwas 3-karbamoilonaftaleno-2-karboksylowy (PIN)
kwas 3-karbamoilo-2-naftoesowy
(3) kwas 3-(aminokarbonylo)naftaleno-2-karboksylowy
kwas 3-(aminokarbonylo)-2-naftoesowy



(2) kwas 2-karbamoilobenzoesowy (PIN)
(3) kwas 2-(aminokarbonylo)benzoesowy kwas ftalamowy (patrz P-65.1.6.1)



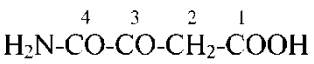
(2) kwas 6-karbamoilonaftaleno-2-sulfonowy (PIN)
(3) kwas 6-(aminokarbonylo)naftaleno-2-sulfonowy



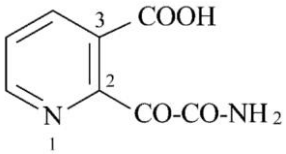
(2) kwas 5-metylo-2-[metylo(fenylo)karbamoilo]benzoesowy (PIN)
(3) kwas 5-metylo-2-[(*N*-metyloanilino)karbonylo]benzoesowy
kwas 5-metylo-2-{[metylo(fenylo)amino]karbonylo}benzoesowy

P-66.1.1.4.1.2 Analogicznie, grupę –CO-CO-NH_2 nazywa się z użyciem przedrostków ‘amino’ i ‘okso’ tak jak w metodzie (1) w P-66.1.1.4.1.1; używając nazwy ‘oksamoil’ jak metodą (2) w P-66.1.1.4.1,1; i przez użycie przedrostka ‘aminooksalil’ jak metodą (3) w P-66.1.1.4.1.1.

Przykłady



(1) kwas 4-amino-3,4-dioksobutanowy (PIN)
(2) kwas oksamoilooctowy
(3) kwas (aminooksalilo)octowy



(2) kwas 2-oksamoilopirydyno-3-karboksylowy (PIN)
(3) kwas 2-(aminooksalilo)pirydyno-3-karboksylowy

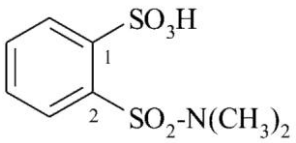
P-66.1.1.4.2 Podstawniki typu –SO_2-NH_2, -SO-NH_2, oraz ich selenowe i tellurowe analogi.

W obecności grup charakterystycznych mających starszeństwo do wymieniania w przyrostku, grupy typu –SO_2-NH_2, -SO-NH_2, oraz odpowiadające im selenowe i tellurowe analogi są nazywane na dwóch drogach odpowiadających metodom (2) i (3) podanym powyżej dla -CO-NH_2 w P-66.1.1.4.1:

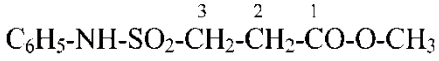
(2) używając nazwę grupy acylowej ‘sulfamoil’ (tylko dla sulfonoamidów), (patrz P-65.3.2.3);

(3) używając przedrostki ‘amino...sulfonyl’, ‘amino...sulfinyl’, ‘amino...selenoil” , amino... seleninyl’, ‘amino...telluronyl’, lub ‘amino...tellurynyl’.

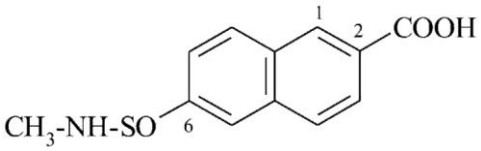
Dla -SO_2-NH_2 metoda (2) generuje nazwy zalecane przez IUPAC (PIN); dla pozostałych grup funkcyjnych metoda (3) jest jedyną dla utworzenia nazwy zalecanej przez IUPAC.
Przykłady:



(2) kwas 2-(dimetylosulfamoilo)benzeno-1-sulfonowy (PIN)
(3) kwas 2-[(dimetyloamino)sulfonylo]benzeno-1-sulfonowy



(2) 3-(fenylosulfoamoilo)propanian metylu (PIN)
(3) 3-[(fenyloamino)sulfonylo]propanian metylu
3-(anilinosulfonylo)propanian metylu



(3) kwas 6-[(metyloamino)sulfinylo]naftaleno-2-karboksylowy (PIN)
(3) kwas 6-[(metyloamino)sulfinylo]-2-naftoesowy

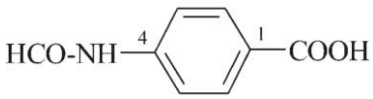
P-66.1.1.4.3 Podstawniki typu –NH-CO-R i NH-SO_2-R

W obecności grupy mającej pierwszeństwo w cytowaniu jako główna grupa charakterystyczna, podstawniki R-CO-NH- lub R-SO_2-NH- (jak również selenowe i tellurowe analogi) N-podstawionego amidu nazywa się dwoma sposobami:

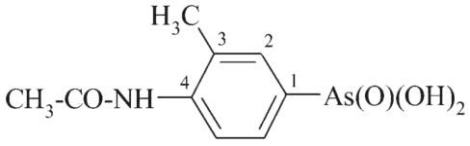
(1) podstawnikowo, stosując przedrostki utworzone przez dodanie litery ‘o’ do nazwy amidu, czyli zmianę słowa ‘amid’ i ‘karboksyamid’ odpowiednio na ‘amido’ i karboksyamido’, ‘diamid’ na ‘diamido’ lub ‘sulfonoamid’ na ‘sulfonoamido’ itd.;
(2) podstawnikowo, używajac przedrostki ‘acyloamino’ utworzone przez zastąpienie nazwy podstawnika „amino’ nazwą grupy acylowej.

Metoda (1) tworzy nazwy zalecane przez IUPAC.

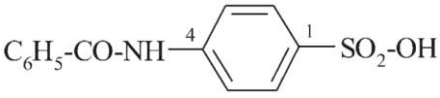
Przykłady:



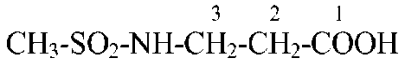
(1) kwas 4-formamidobenzoesowy (PIN)
(2) kwas 4-(formyloamino) benzoesowy



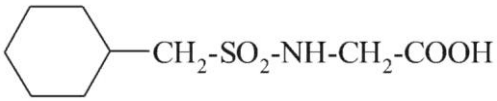
(1) kwas (4-acetamido-3-metylofenylo)arsonowy (PIN)
(2) kwas [4-(acetyloamino)-3-metylofenylo]arsonowy



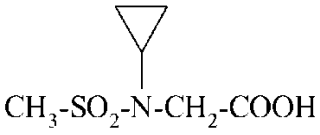
(1) kwas 4-benzamidobenzeno-1-sulfonowy (PIN)
(2) kwas 4-(benzoiloamino)benzeno-1-sulfonowy



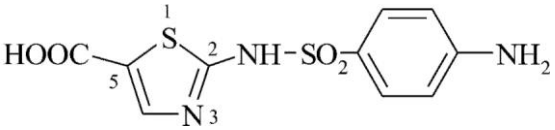
(1) kwas 3-(metanosulfonoamido)propanowy (PIN)
(2) kwas 3-[(metanosulfonylo)amino]propanowy



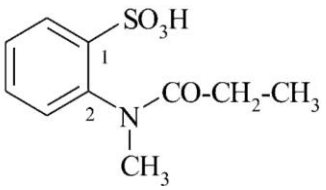
(1) *N*-(cykloheksylometylosulfonylo)glicyna (PIN)
kwas 1-(cykloheksylometanosulfonamido)octowy
(2) kwas {[(cykloheksylometylo)sulfonylo]amino}octowy



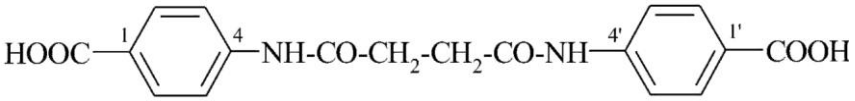
(1) *N*-cyklopropylo-N-(metanosulfonylo)glicyna
(2) kwas [*N*-cyklopropylo(metanosulfonylo)amino]octowy
kwas [*N*-cyklopropylo-N-(metylosulfo)amido]octowy



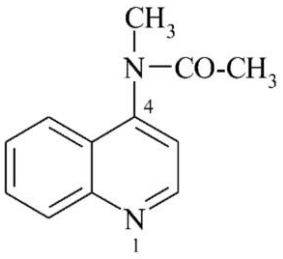
(1) kwas 2-(4-aminobenzeno-1-sulfonamido)-1,3-tiazolo-5-karboksylowy (PIN)
(a nie kwas 2-sulfaniloamidotiazolo-5-karboksylowy; kwas sulfanilowy nie jest zachowaną nazwą)
(2) kwas 2-{[(4-aminofenylo)sulfonylo]amino}-1,3-tiazolo-5-karboksylowy



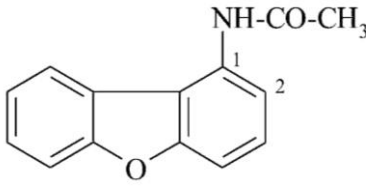
(1) kwas 2-(*N*-metylopropanoamido)benzeno-1-sulfonowy (PIN)
(2) kwas 2[metylo(propanoilo)amino]benzeno-1-sulfonowy



(1) kwas 4,4′-butanodiamidodibenzoesowy (PIN)
(2) kwas 4,4′-butanodioilobis(azanodiylo)dibenzoesowy
kwas 4,4′-[1,4-dioksobutano-1,4-diylobis(azanodiylo)dibenzoesowy



N-metylo-(chinolin-4-ylo)acetamid (PIN)
[nie 4-(*N*-metyloacetamido)chinolina]
{nie 4-[acetylo(metylo)amino]chinolina}



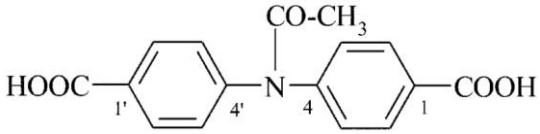
N-(dibenzo[b,d]furan-1-ylo]acetamid (PIN)
(nie 1-acetamidodibenzofuran)
[nie 1-(acetyloamino)dibenzofuran]

Kiedy amid jest główną grupą funkcyjną, musi być nazwany jako taki. Metoda traktowania amidów jako podstawników policyklicznych układów pierścieniowych opisana w zaleceniach z 1993 r (odn. 2) powinna zostać zaniechana, nawet w nomenklaturze ogólnej (patrz również P-66.1.3).

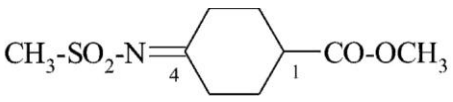
P-66.1.1.4.4 Podstawniki R-CO-N< i R-CO-N=, lub R-SO_2-N< i R-SO_2-N= (oraz ich analogi selenowe i tellurowe)

W obecności grupy mającej pierwszeństwo do wymieniania jako główna grupa charakterystyczna, podstawniki R-CO-N< i R-CO-N=, lub R-SO_2-N< i R-SO_2-N= (oraz ich analogi selenowe i tellurowe) N-podstawionego amidu nazywa sie łącząc nazwy grup acylowych z nazwami odpowiednich podstawników atomu azotu, odpowiednio, azanodiyl i imino.

Przykłady:



kwas 4,4′-(acetyloazanodiylo)dibenzoesowy (PIN)



4-[(metanosulfonylo)imino]cykloheksano-1-karboksylan metylu (PIN)

P-66.1.1.4.5 Podstawniki wywodzące się z oksamidu, H_2N-CO-CO-NH_2

P-66.1.1.4.5.1 Przedrostkami dla grupy H_2N-CO-CO-NH- są ‘oksamoiloamino’ (preferowany przedrostek) lub ‘amino(okso)acetamido’. Preferowanym przedrostkiem dla grupy H_2N-CO-CO-N= jest ‘oksamoiloimino’.

Przykład:

H_2N-CO-CO-N=CH-CH_2-COOH

kwas 3-(oksamoiloimino)propanowy (PIN)
kwas 3-{[amino(okso)acetylo]imino}propanowy

P-66.1.1.4.5.2 Przedrostki wywodzące się z oksamidu w nazwach multiplikacyjnych

Powiązanymi preferowanymi przedrostkami dla grup -HN-CO-CO-NH-, >N-CO-CO-N< , =N-CO-CO-N= są, odpowiednio, ‘oksalilobis(azanodiyl)’, ‘oksalilodinitryl’ i ‘oksalilobis(azanylyliden)’. Preferowanym przedrostkiem dla grupy H_2N-CO-CO-N< jest ‘oksamoiloazanodiyl’

Przykład:

NC-CH_2-NH-CO-CO-NH-CH_2-CN

N[1],*N*[2]-bis(cyjanometylo)oksamid (PIN)
(nie 2,2′-oksalilobis(azanodiylo)]diacetonitryl;
ani 2,2′-[etanodioilobis(azanodiylo)]diacetonitryl

P-66.1.2 Amidy drugorzędowe i trzeciorzędowe

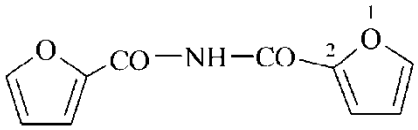
P-66.1.2.1 Amidy o ogólnym wzorze $(R\text{-}CO)_2NH$, $(R\text{-}SO_2)_2NH$, itd i $(R\text{-}CO)_3N$, $(R\text{-}SO_2)_3N$ itd., odpowiednio, nazywa się jako *N*-acylowe pochodne amidu pierwszorzędowego o najwyższym starszeństwie. W analogiczny sposób tworzy się preferowane nazwy przedrostków. Nazwy utworzone przez podstawienie macierzystego wodorku ‘azanu’ lub pseudomacierzystego wodorku ‘aminy’ grupami acylowymi, przykładowo diacetyloazano lub diacetyloamino jak to było w zaleceniach z 1993 r (odn. 2) nie są włączone do tych zaleceń,podobnie jak nazwy zwyczajowe diacetamid, triacetamid, dibenzamid czy też tribenzamid.

Przykłady:

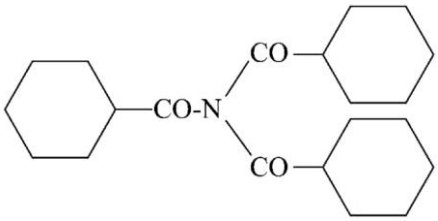
HCO-NH-CHO
N-formyloformamid (PIN)
(nie diformyloazan)
(nie diformyloamina)
(nie diformamid)

$(CH_3\text{-}CO)_2N$-
N-acetyloacetamido (zalecany przedrostek)
diacetyloamino
(nie diacetyloazanyl)
(nie diacetamido)

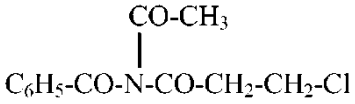
C_6H_5-CO-NH-CO-CH_3 *N*-acetylobenzamid (PIN)
[nie acetylo(benzoilo)azan]
[nie acetylo(benzoilo)amina]



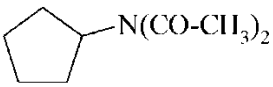
N-(furano-2-karbonylo)furano-2-karboksyamid (PIN)
[nie di(furanokarbonylo)azan]
[nie di(furano-2-karbonylo)amina]



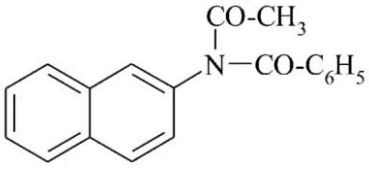
N,*N*-di(cykloheksanokarbonylo)cykloheksanokarboksamid (PIN)
[nie tri(cykloheksanokarbonylo)azan]
[nie tri(cykloheksanokarbonylo)amina]



N-acetylo-*N*-(3-chloropropanoilo)benzamid (PIN)
[nie acetylo(benzoilo)(3-chloropropanoilo)azan]



N-acetylo-*N*-cyklopentyloacetamid (PIN)
[nie diacetylo(cyklopentylo)azan]
[nie diacetylo(cyklopentylo)amina]



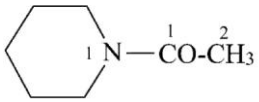
N-acetylo-*N*-(naftalen-2-ylo)benzamid (PIN)
[nie acetylo(benzoilo)naftalen-2-ylo)azan]
[nie acetylo(benzoilo)naftalen-2-ylo)amina]

P-66.1.3 ‘Ukryte’ amidy

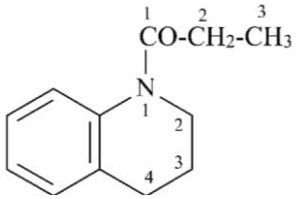
Grupa *N*-acylowa dołączona do atomu azotu układu heterocyklicznego nazywana jest ‘ukrytym’ amidem, ponieważ nazwy amid nie można zastosować bez naruszenia zasad nomenklatury podstawnikowej, Zwyczajowy sposób nazywania takich związków polegający na nazwaniu grupy acylowej stanowiącej podstawnik atomu azotu w układzie heterocyklicznym jest dozwolony, ale tylko w ogólnej nomenklaturze. Obecnie takie związki traktuje się jako pseudoketony (patrz P-64.3) i zalecane przez IUPAC nazwy tworzy się w w taki właśnie sposób.

Obecnie zalecane jest, aby grupę *N*-acylową dołączoną do atomu azotu układu heterocyklicznego nazywać jak pseudoketon (patrz P-64.1.2.1, P-64.3), a nie jak acylowy podstawnik atomu azotu jak to było zalecane uprzednio. Ten drugi sposób może być stosowany tylko w przypadku nomenklatury ogólnej.

Przykłady:



1-(piperydyn-1-ylo)etan-1-on (PIN)
acetylopiperydyna



1-(3,4-dihydrochinolin-1(2*H*)-ylo)propan-1-on (PIN)
1-propanoilo-1,2,3,4-tetrahydrochinolina
1-propionylo-1,2,3,4-trahydrochinolina

P-66.1.4 Chalkogenowe analogi amidów

Chalkogenowe nazywy amidów tworzy się systematycznie. Przedrostki, takie jak ‘tio’ modyfikujące nazwy zachowane, nie są już zalecane.

P-66.1.4.1 Nazwy chalkogenowych analogów pierwszorzędowych amidów

P-66.1.4.1.1 Nazwy tworzy się z użyciem przyrostków modyfikowanych nomenklaturą zamienną funkcji i używając przedrostków i wrostków.

Przykłady:

-(C)S-NH_2	-tioamid (preferowany przyrostek)
-CS-NH_2	-karbotioamid (preferowany przyrostek)
-S(O)(S)-NH_2	-sulfonotioamid (preferowany przyrostek)
-S(S)(S)-NH_2	-sulfonoditioamid (preferowany przyrostek)
-S(S)-NH_2	-sulfinotioamid (preferowany przyrostek)

Bardziej obszerna lista przykładów zawarta jest w Tabeli 4.4.

Przykłady:

$HCS\text{-}NH_2$ $CH_3\text{-}CS\text{-}NH_2$

metanotioamid (PIN) etanotioamid (PIN)
tioformamid tioacetamid

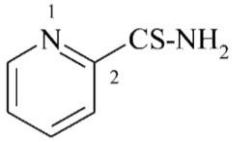
$C_6H_5\text{-}CS\text{-}NH_2$ $H_2N\text{-}CS\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}CS\text{-}NH_2$

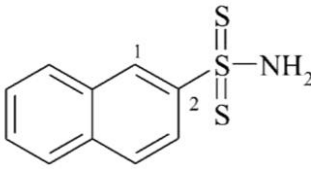
benzenokarbotioamid (PIN) butanoditioamid (PIN)

tiobenzamid

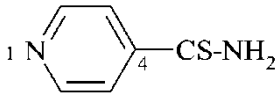
CH_3-$(CH_2)_4$-CS-NH_2 CH_3-CH_2-CS-NH_2

heksanotioamid (PIN) propanotioamid (PIN)
(nie tiopropionoamid)





pirydyno-2-karbotioamid (PIN) naftaleno-2-sulfonoditioamid (PIN)



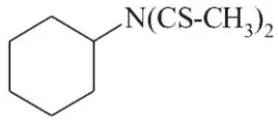
pirydyno-4-karbotioamid (PIN)
(nie tioizonikotynamid)

P-66.1.4.2 Nazwy chalkogenowych analogów amidów drugorzędowych i trzeciorzędowych

Nazwy tworzy się dodając do nazw opisanych w P-66-1.4.1.1 odpowiednie przedrostki.

Przykłady:

CH_3-CS-NH-CS-CH_3 *N*-(etanotioilo)etanotioamid (PIN)
N-(tioacetylo)tioacetamid



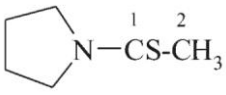
N-cykloheksylo-*N*-(etanotioilo)etanotioamid (PIN)
N-cykloheksylo-*N*-(tioacetylo)tioacetamid

CH_3-CH_2-CS-NH-CO-CH_3 *N*-(propanotioilo)acetamid (PIN)

P-66.1.4.3 Nazwy chalkogenowych pochodnych ‘ukrytych’ amidów

Nazwy tworzy się jak opisano w P-64.6.1 dla chalkogenowych pochodnych pseudoketonów.

Przykład:



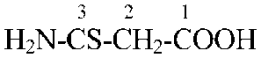
1-(pirolidyn-1-ylo)etano-1-tion (PIN)
[nie 1-(etanotioilo)pirolidyna]

P-66.1.4.4 Nazwy podstawników tworzonych z chalkogenowych pochodnych amidów

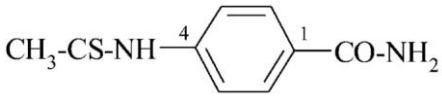
W obecności grup funkcyjnych mających pierwszeństwo wymieniania jako przyrostki, funkcję amidową przedstawia się dwoma sposobami:

(1) przedrostkiem utworzonym przez dodanie litery ‘o’ do nazwy amidu
(2) odpowiednimi przedrostkami, takimi jak amino, w połączeniu z sulfanylideno lub tiookso, jak również przez karbonotioil (nie tiokarbonyl) dla -CS- lub karbamotioil (nie tiokarbamoil) dla -CS-NH_2.

Przykłady:

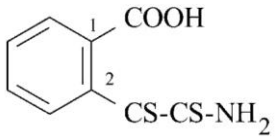


kwas 3-amino-3-sulfanylidenopropanowy (PIN)
kwas 3-amino-3-tioksopropanowy
kwas karbamotioilooctowy
kwas (aminokarbonotioilo)octowy



4-(etanotioamido)benzamid (PIN)
4-[(etanotioilo)amino]benzamid
4-(tioacetamido)benzamid

CH_3-S(S)-NH-CH_2-COOH kwas [(metanosulfinotioilo)amino]octowy (PIN)



kwas [amino(sulfanylideno)etanotioilo]benzoesowy (PIN)

P-66.1.5 Laktamy, laktimy, sultamy i sultimy

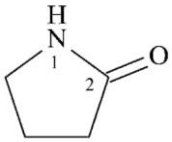
P-66-1.5.1 Laktamy i laktimy

Wewnątrzcząsteczkowe amidy kwasów aminokarboksylowych, -CO-NH-, noszą nazwę ‘laktamy’, a ich tautomery, -C(OH)=N- noszą nazwę ‘laktimy’. Nazwy laktamów tworzy się dwoma metodami:

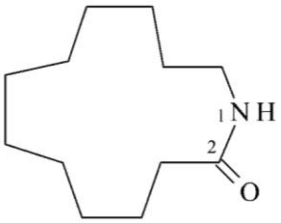
(1) jako heterocykliczne pseudoketony;
(2) zastępując słowa ‘kwas ...owy’ słowem ‘laktam’ kończącym nazwę macierzystego kwasu bez wymieniania podstawnika aminowego i wprowadzenie lokantu oznaczającego położenie grupy aminowej umieszczonego pomiędzy ‘o’ i ‘laktam’. Laktimy nazywa się w ten sam sposób z użyciem słowa ‘laktim” zamiast ‘laktam’

Metoda (1) tworzy preferowane nazwy IUPAC.

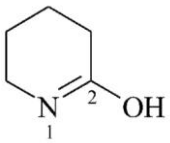
Przykłady:



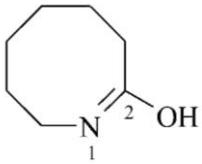
pirolidyn-2-on (PIN)
butano-4-laktam



1-azacyklotridekan-2-on (PIN)
dodekano-12-laktam



3,4,5,6-tetrahydropirydyn-2-ol (PIN)
pentano-6-laktim



3,4,5,6,7,8-heksahydroazocyn-2-ol (PIN)
1,2-didehydroazokan-2-ol
heptano-7-laktim

P-66.1.5.2 Sultamy, sultimy i wewnątrzcząsteczkowe amidy kwasów sulfinowych.

P-66.1.5.2.1 Wewnątrzcząsteczkowe amidy kwasów aminosulfonowych noszą nazwę ‘sultamy’ i można je nazywać trzema sposobami:

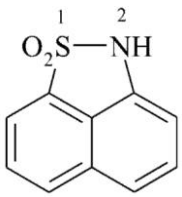
(1) jako heterocykliczne heterony;

(2) używając terminu ‘sultam’ oznaczającego cykliczną grupę –NH-SO_2-, wymienianego po nazwie macierzystego wodorku poprzedzonej parą lokantów opisujących miejsce dołączenia, odpowiednio, grupy sulfonowej i atomu azotu w taki sposób, żeby lokant grupy sulfonowej był cytowany jako pierwszy, i jeśli jest możliwość wyboru, by był to niższy lokant. Przedrostki zwielokrotniające i pary lokantów rozdzielone dwukropkiem stosuje się do wskazania dwóch lub więcej pierścieni sultamowych.

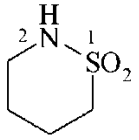
(3) jako heterocykle, stosując nomenklaturę klasowo-funkcyjną, poprzez użycie terminu ‘oksyd’(‘tlenek’).

Sposób (1) prowadzi do preferowanych nazw IUPAC.

Przykłady:



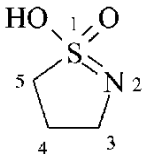
(1) 1λ^6-nafto[1,8-*cd*][1,2]tiazolo-1,1(2*H*)-dion (PIN)
(3) 1,1-dioksyd 2*H*-nafto[1,8-*cd*][1,2]tiazolu
(2) naftaleno-1,8-sultam



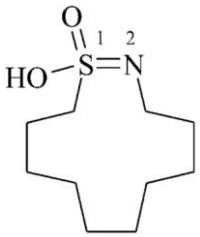
(1) 1λ^6,2-tiazynan-1,1-dion (PIN)
(3) 1,1-dioksyd 1,2-tiazynanu
(2) butano-1,4-sultam

P-66.1.5.2.2 Sultimy są tautomerami sultamów i nazywa się je jak opisano w P-66.1.5.2.1 dla sultamów, używając terminu ‘sultim’ w miejsce ‘sultam’.

Przykłady:



(1) 1-hydroksy-4,5-dihydro-3*H*-1λ^6,2-tiazol-1-on (PIN)
(3) 1-oksyd 1-hydroksy-4,5-dihydro-3*H*-1λ^6,2-tiazolu
(2) propano-1,3-sultim

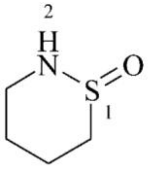


(1) 1-hydroksy-1λ^6-tia-2-azacyklododeka-1-en-1-on (PIN)
(3) 1-oksyd 1-hydroksy-1λ^6-tia-2-azacyklododeka-1-en-1-onu
(2) dekano-1,10-sultim

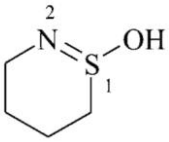
P-66.1.5.2.3 Wewnątrzcząsteczkowe amidy kwasów aminosulfinowych

Cykliczne amidy kwasów aminosulfinowych i ich tautomery nazywa się jako związki heterocykliczne.

Przykłady:



1λ^4,2-tiazinan-1-on (PIN)
1-oksyd 1,2-tiazinanu



3,4,5,6-tetrahydro-1λ^4,2-tiazin-1-ol (PIN)

P-66.1.6 Amidy wywodzące się z kwasu karbonowego, cyjanowego oraz z kwasów di- i polikarbonowych.

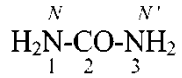
P-66.1.6.1 Amidy pochodzące od kwasu karbonowego i związków pokrewnych

P-66.1.6.1.1 Mocznik i jego podstawione pochodne
P-66.1.6.1.2 Izomocznik i jego pochodne
P-66.1.6.1.3 Chalkogenowe analogi mocznika i izomocznika

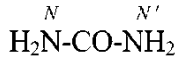
P-66.1.6.1.4 Kondensaty mocznika

P-66.1.6.1.1 Mocznik i jego podstawione pochodne

P-66.1.6.1.1.1 Związek $H_2N\text{-}CO\text{-}NH_2$ ma zachowaną nazwę ‘mocznik’, która jest preferowaną nazwą IUPAC, z lokantami N oraz N’ jak to pokazano na wzorze strukturalnym poniżej. Nazwą systematyczną jest ‘diamid karbonowy’. Lokanty 1, 2 i 3 były używane w przeszłości i mogą być używane obecnie w nomenklaturze ogólnej.



mocznik (PIN)

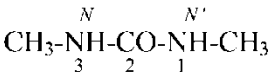


diamid karbonowy

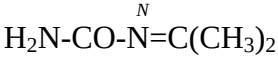
Obecnie w preferowanej nazwie IUPAC mocznika nie są używane lokanty cyfrowe

P-66.1.6.1.1.2 Pochodne mocznika utworzone przez podstawienie atomu (-ów) azotu nazywa się zgodnie z zasadami starszeństwa jako produkty podstawienia mocznika, który traktuje się jak amid kwasu karbonowego. Amidy kwasu cyjanowego oraz amidy kwasów di- i polikarbonowych mają starszeństwo takie jak odpowiadające im kwasy. (patrz P-42-2).

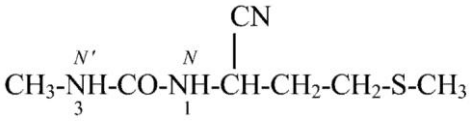
Przykłady:



N,*N*′-dimetylomocznik (PIN)
diamid *N*,*N*′-dimetylokarbonowy



N-(propan-2-ylideno)mocznik (PIN)
izopropylidenomocznik
diamid *N*-(propan-2-ylideno)karbonowy



N-[1-cyjano-3-(metylosulfanylo)propylo]-*N*′-metylomocznik (PIN)
diamid *N*-[1-cyjano-3-(metylosulfanylo)propylo]-*N*′-metylokarbonowy

P-66.1.6.1.1.3 Przedrostki dla podstawników utworzonych z mocznika tworzy się w sposób systematyczny. Nie są zalecane przedrostki ‘ureido’ oraz ‘ureilen’.

Przedrostki ‘ureido’ oraz ‘ureilen’ nie są już akceptowane w nomenclaturze IUPAC. Przedrostki ‘karbamoiloamino’ i , odpowiednio, ‘karbonylobis(azanodiylo)’ są zalecane w preferowanyche nazwach IUPAC oraz w ogólnej nomenklaturze.

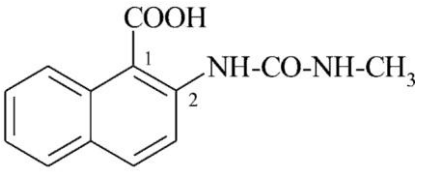
$H_2N\text{-}CO\text{-}NH–$

–HN-CO-NH–

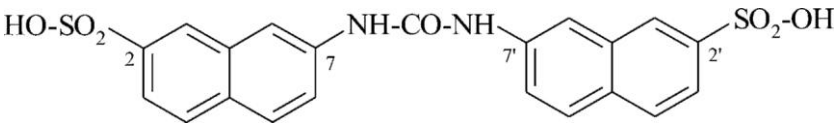
karbamoiloamino (zalecany przedrostek)
(aminokarbonylo)amino
(nie ‘ureido’)

karbonylobis(azanodiylo) (preferowany przedrostek; do użycia w nomenklaturze multiplikacyjnej
(nie ‘ureileno’)

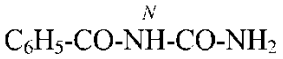
Przykłady:



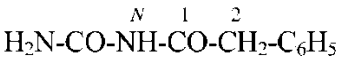
kwas 2-[(metylokarbamoilo)amino]naftaleno-1-karboksylowy
kwas 2-[(metyloamino)karbonylo]amino-1-naftoesowy
[nie kwas 2-(3-metyloureido)naftaleno-1-karboksylowy]

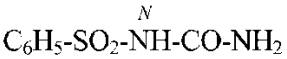


kwas 7,7′-[karbonylobis(azanodiylo)]di(naftaleno-2-sulfonowy (PIN)
[nie kwas 7,7′-ureilenodi(naftaleno-2-sulfonowy]



N-karbamoilobenzamid (PIN)
N-(aminokarbonylo)benzamid



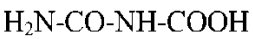


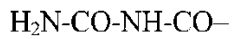
N-karbamoilobenzenosulfonamid (PIN)
N-(aminokarbonylo)benzenosulfonamid
N-karbamoilo-2-fenyloacetamid (PIN)
N-(aminokarbonylo)-2-fenyloacetamid

P-66.1.1.4. Kwasy karboksylowe pochodne mocznika

Znane są dwa kwasy karboksylowe wywodzące się z mocznika. Są to ‘kwas allofanowy’ H_2N-CO-NH-COOH oraz ‘kwas hydantoinowy’ H_2N-CO-NH-CH_2-COOH. Obie te nazwy obecnie nie są zalecane. Preferowane nazwy IUPAC dla obu kwasów i ich pochodnych tworzy się według reguł nomenklatury systematycznej.

Przykłady:





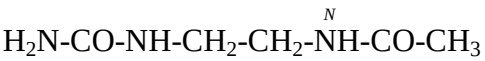
kwas karbamoilokarbamowy (PIN) karbamoilokarbamoil- (preferoway przedrostek)
kwas (aminokarbonylo)karbamowy [(aminokarbonylo)amino]karbonyl-

N-karbamoiloglicyna
kwas (karbamoiloamino)octowy

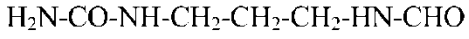
P-66.1.1.5 Pozycja mocznika w szeregu starszeństwa amidów

Amidy są uszeregowane tak jak odpowiadające im kwasy (patrz P-42). Z tego względu w nomenklaturze podstawnikowej amidy kwasów karboksylowych, włączając w to formamid, mają pierwszeństwo przed mocznikiem.

Przykłady:



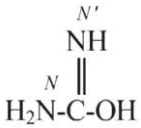
N-[2-(karbamoiloamino)etylo]acetamid (PIN)
N-{2-[(aminokarbonylo)amino]etylo}acetamid



N-[3-(karbamoiloamino)propylo]formamid (PIN)
[nie 1-(3-formamidopropylo)mocznik ani nie
1-[3-(formyloamino)propylo]mocznik; formamid ma
pierwszeństwo przed mocznikiem, patrz P-41]

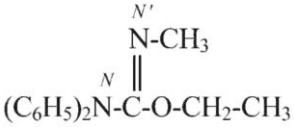
P-66.1.6.1.2 Izomocznik

P-66.1.6.1.2.1 Kwas imidowy $H_2N-C(OH)=NH$, tautomer mocznika, nazywa się ‘kwas karboamimidowy’, skrócona forma systematycznej nazwy zamiany funkcji ‘kwas karbonoamidimidowy’. Nazwa ‘izomocznik’ nie jest już zalecana, ale pozostaje jako nazwa klasy utworzonej zgodnie z nomenklaturą zamienną funkcji. W preferowanych nazwach IUPAC pochodne kwasu karboamimidowego nazywa się z użyciem lokantów *N* i *N′*. Ponieważ nazwa izomocznik nie jest zalecana nawet w ogólnej nomenklaturze, nie istnieje potrzeba używania lokantów numerycznych jak to było zalecane uprzednio. Jeśli położenie wiązania podwójnego nie jest znane, używany jest tylko lokant *N*.

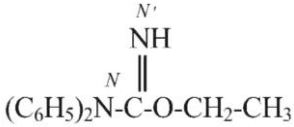


kwas karboamimidowy (PIN)
(ale nie izomocznik)

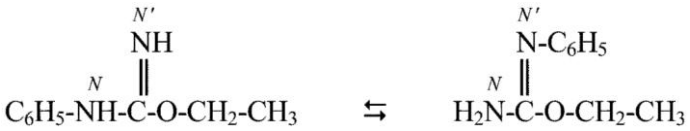
Przykłady:



N′-metylo-*N*,*N*-difenylokarboamimidan etylu (PIN)
(nie *O*-etylo-*N′*-metylo-*N*,*N*-difenyloizomocznik)



N,*N*-difenylokarbamimidan etylu (PIN)
(nie *O*-etylo-*N*,*N*-difenyloizomocznik)

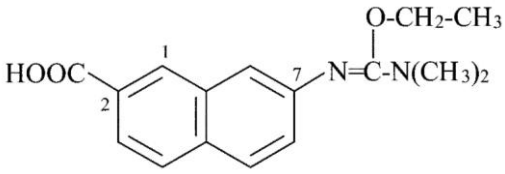


N-fenylokarbamimidan etylu (PIN)
(nie *O*-etylo-*N*-fenyloizomocznik)

P-66.1.6.2.2 Grupy HN=C(OH)-NH- oraz H_2N-C(OH)=N- wywodzące się z izomocznika nazywa się, odpowiednio, jako „(C-hydroksykarbonimidoilo)amino-’ (preferowany przedrostek) lub ‘[hydroksy(imino)metylo]amino-‘ i ‘[amino(hydroksy)metylideno]amino-‘ (preferowany przedrostek). Pisany kursywą lokant ‘*C*’ jest użyty w preferowanym przedrostku dla uniknięcia niejednoznaczności z *N*-podstawnikiem, a nawiasy wokół ‘hydroksy’ mają podkreślić, że grupa ‘aminowa’ nie jest podstawiona ‘hydroksylem’.

Przedrostki 1-izoureido i 3-izoureido nie są więcej zalecane.

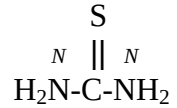
Przykład:



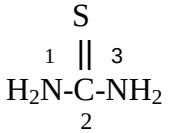
kwas 7-{[(dimetyloamino)etoksymetylideno]amino}naftaleno-2-karboksylowy
[nie kwas 7-(2-etylo-1,1-dimetylo-3-izoureido)naftaleno-2-karboksylowy

P-66.1.6.1.3 Chalkogenowe analogi mocznika i izomocznika

P-66.1.6.1.3.1 Chalkogenowe analogi mocznika nazywa się według nomenklatury zamiennej funkcji z użyciem przedrostków ‘tio’, ‘seleno’ i ‘telluro’. W preferowanych nazwach IUPAC używane są lokanty literowe *N* i *N*’. Lokanty cyfrowe mogą być użyte dla tiomocznika w nomenklaturze ogólnej.



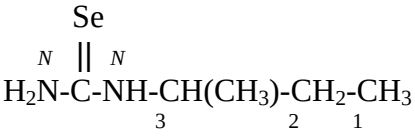
diamid karbonotiowy



tiomocznik (PIN)

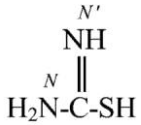
Lokanty cyfrowe przestają być używane dla tiomocznika w preferowanych nazwach IUPAC.

Przykład:



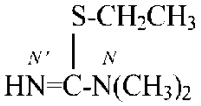
N-(butan-2-ylo)selenomocznik (PIN)
N-(1-metylopropylo)selenomocznik
diamid *N*-(butan-2-ylo)karbonoselenowy

P-66.1.6.1.3.2 Nazwy chalkogenowych analogów izomocznika tworzy się zgodnie z nomenklaturą zamienną funkcji przy użyciu odpowiednich chalkogenowych infiksów, takich jak przykładowo kwas karbamimidotiowy, a nie izotiomocznik. Pisane kursywą lokanty *N* i *N′* są stosowane w preferowanych nazwach IUPAC. Jeśli położenie wiązania podwójnego nie jest znane, używa się lokanty *S, Se* lub *Te* i *N* dla przypisania podstawnika do odpowiedniego atomu.

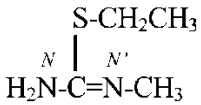


kwas karbamimidotiowy (PIN)
(nie izotiomocznik)

Przykłady:



N,*N*-dimetylokarbamimidotionian etylu (PIN)
(nie *S*-etylo-*N*,*N*-dimetyloizotiomocznik)



N′-metylokarbamimidotionian etylu (PIN)
(nie *S*-etylo-*N′*-metyloizotiomocznik)

W powyższym przykładzie, w przypadku nieznajomości pozycji podwójnego wiązania, nazwa powinna być:

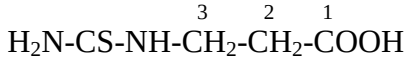
N-metylokarbamimidotionian etylu (PIN)
(nie *S*-etylo-*N*-metyloizomocznik)

P-66.1.6.1.3.3 Przedrostki dla podstawników pochodzących z chalkogenowych analogów mocznika i izomocznika są następujące:

H_2N-CS-NH	karbamotioiloamino (preferowany przedrostek) [amino(sulfanylideno)metylo]amino-
HN=C(SH)-NH-	(C-sulfanylokarbonimidoilo)amino (preferowany przedrostek) [imino(sulfanylo)metylo]amino-

H_2N-C(SH)=N- [amino(sulfanylo)metylideno]amino-
(preferowany przedrostek)

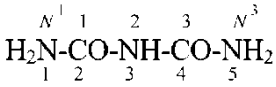
Przykład:

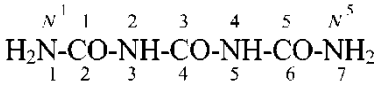


kwas 3-(karbamotioiloamino)propanowy
kwas 3-{[amino(sulfanylideno)metylo]amino}propanowy

P-66.1.6.1.4 Skondensowane moczniki

Skondensowane moczniki H_2N-[CO-NH]$_n$-H gdzie *n*=2, 3 i 4 nazywa się systematycznie jako diamidy kwasu imidodikarbonowego, diimidotrikarbonowego, triimidotetrakarbonowego itd. nazwami zamiennymi funkcji pochodzacymi od odpowiednich kwasów di- lub polikarbonowych. Nazw biuret, triuret itd. nie zaleca się jako preferowanych nazw IUPAC. Analogi chalkogenowe opisuje się przedrostkami zamiennymi funkcji wymienianymi alfabetycznie wraz ‘imido’ przed nazwą odpowiedniego kwasu di- lub polikarbonowego. Lokanty, jak to pokazano poniżej ponad wzorami struktur, są używane, w miarę potrzeby, do wskazania położenia podstawników i przedrostków zamiennych funkcji,. Preferowane nazwy IUPAC używają tych lokantów, które są również zalecane dla amidów kwasów imidopolikarbonowych (patrz P-66.4.1.2.2). System pełnego liczbowego ponumerowania stosowany uprzednio i pokazany na przykładach pod wzorami strukturalnymi może być używany w ogólne nomenklaturze j.



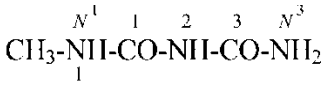


diamid 2-imidokarbonowy (PIN)
biuret

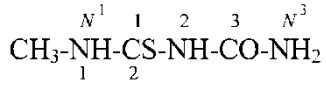
diamid 2,4-diimidotrikarbonowy (PIN)
triuret

Cyfrowe lokanty dla skondensowanych moczników nie są już używane w preferowanych nazwach IUPAC.

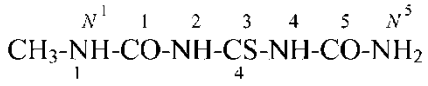
Przykłady:



diamid N^1-metylo-2-imidodikarbonowy (PIN)
1-metylobiuret



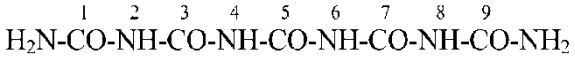
diamid N^1-metylo-2-imido-1-tiodikarbonowy (PIN)
1-metylo-2-tiobiuret



diamid *N*-metylo-2,4-diimido-3-tiotrikarbonowy (PIN)
1-metylo-4-tiotriuret

Dla polimoczników, dla których $n = 5$ lub więcej, zastosowanie nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu prowadzi do preferowanych nazw IUPAC.

Przykład:

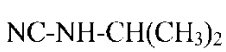


3,5,7-triokso-2,4,6,8-tetraazanonano-1,9-diamid (PIN)
pentauret

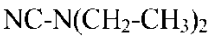
P-66.1.6.2 Amidy pochodne kwasu cyjanowego

Tradycyjna nazwa ‘cyjanamid’ jest utrzymana dla $NC\text{-}NH_2$ i jest preferowaną nazwą IUPAC. Podstawienie jest dozwolone na grupie $–NH_2$. Systematyczną nazwą zamienną funkcji jest amid karbononitrydu.

Przykłady:



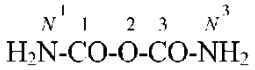
(propan-2-ylo)cyjanamid (PIN)
amid (propan-2-ylo)karbononitrydowy



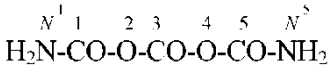
dietylocyjanamid (PIN)
amid dietylokarbononitrydowy

P-66.1.6.3 Amidy kwasów di- i polikarbonowych

Systematyczne nazwy amidów kwasów polikarbonowych tworzy się dodając nazwę klasy funkcyjnej ‘amid’ do nazwy odpowiedniego kwasu, poprzedzonej przedrostkiem zwielokrotniającym ‘di’ dla wskazania obecności dwóch grup $–NH_2$. Analogi chalkogenowe opisuje się przedrostkami zamiennymi funkcji. Cyfrowe i literowe lokanty służą do ponumerowania struktur.

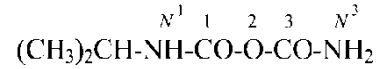


diamid dikarbonowy (PIN)

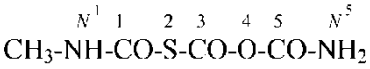


diamid trikarbonowy (PIN)

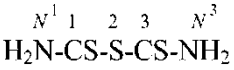
Przykłady:



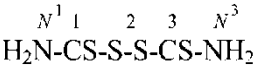
diamid *N*-(propan-2-ylo)dikarbonowy (PIN)
diamid *N*-izopropylodikarbonowy



diamid N^1-metylo-2-tiotrikarbonowy (PIN)



diamid 1,2,3-tritiodikarbonowy (PIN)
(nie ‘monosulfid tiuramu’)

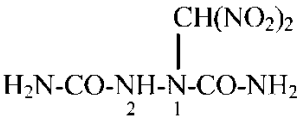


diamid 2-ditioperoksy-1,3-ditiokarbonowy (PIN)
(nie ‘disulfid tiuramu’)

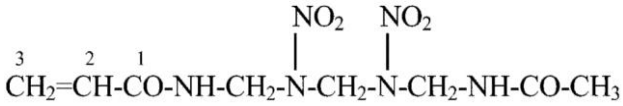
P-66.1.7 Polifunkcyjne amidy

Amidy w szeregu starszeństwa klas związków wskazywanych przyrostkami (patrz P-41) zajmują miejsce po kwasach, bezwodnikach, estrach i halogenkach kwasowych. W obrębie klasy amidów, ranga amidów określana jest w taki sam sposób jak odpowiadających im kwasów. Starszeństwo w numerowaniu polifunkcyjnych amidów jest zgodne z opisanym dla kwasów, dla których patrz P-65.1.2.3 i P-65.3.4.

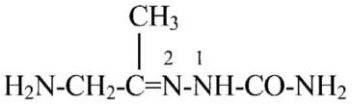
Przykłady:



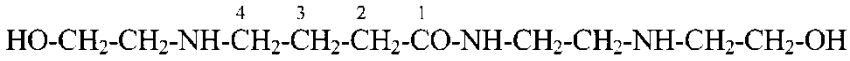
1-(dinitrometylo)hydrazyno-1,2-dikarboksyamid (PIN)



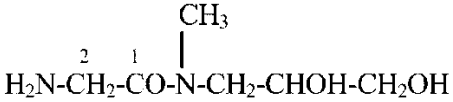
N-{[{[(acetamidometylo)(nitro)amino]metylo}(nitro)amino]metylo}prop-2-enoamid (PIN)
N-{[({[(acetyloamino)metylo](nitro)amino}metylo)(nitro)amino]metylo}prop-2-enoamid



2-(1-aminopropan-2-ylideno)hydrazyno-1-karboksyamid (PIN)



4-[(2-hydroksyetylo)amino]-*N*-{2-[(2-hydroksyetylo)amino]etylo}butanoamid (PIN)

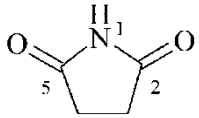


2-amino-*N*-(2,3-dihydroksypropylo)-N-metyloacetamid (PIN)

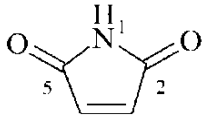
P-66.2 Imidy

P-66.2.1. Imidy są związkami zawierającymi ugrupowanie strukturalne –CO-NH-CO-. Acykliczne imidy są *N*-acylowymi pochodnymi pierwszorzędowych amidów i są tak właśnie nazywane (patrz P-66.1.2.1). Dla cyklicznych imidów preferowane są nazwy jako heterocyklicznych pseudoketonów. Można je również nazywać przez zastąpienie przyrostka ‘diowy’ lub ‘dikarboksylowy’ w nazwie odpowiedniego dizasadowego kwasu lub też przyrostka ‘owy’ w utrzymanych nazwach dikwasów przez „imido’ lub ‘dikarboksyimido’.

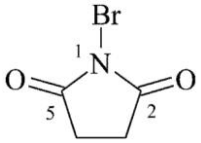
Przykłady:



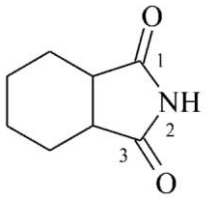
pirolidyno-2,5-dion (PIN)
sukcynoimid



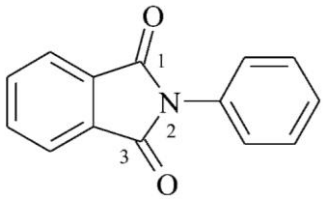
1*H*-pirolo-2,5-dion (PIN)
pirolo-2,5-dion



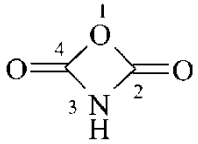
1-bromopirolidyno-2,5-dion (PIN)
(nie *N*-bromosukcynoimid;
podstawienie nie jest dozwolone dla
sukcynoimidu)



heksahydro-2*H*-izoindolo-1,3(2*H*)-dion (PIN)
heksahydro-2*H*-izoindolo-1,3-dion
cykloheksano-1,2-dikarboksyimid

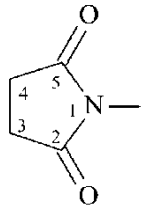


2-fenylo2*H*-izoindolo-1,3(2*H*)-dion (PIN)
2-fenylo-2*H*-izoindolo-1,3-dion
N-fenyloftalimid



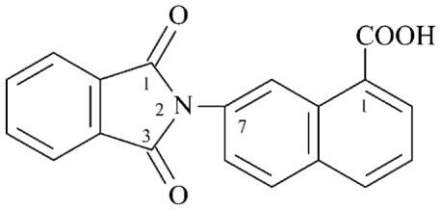
1,3-oksazetydyno-2,4-dion (PIN)

P-66.2.2 Przedrostki pochodzące od imidów w wyniku usunięcia atomu wodoru przyłączonego do imidowego atomu azotu nazywa się systematyczne jako przedrostki preferowane. Jednakże, w ogólnej nomenklaturze, mogą one być tworzone z nazw odpowiednich imidów poprzez zamianę końcówki ‘imid’ na ‘imido’.



sukcynoimido
2,5-dioksopirolidyn-1-ylo
(przedrostek preferowany)

Przykład:



kwas 7-ftalimido-1-naftoesowy
kwas 7-(1,3-diokso-1,3-dihydro-2*H*-izoindol-2-ilo)naftaleno-1-karboksylowy (PIN)

P-66.3 HYDRAZYDY

P-66.3.0 Definicje
P-66.3.1 Nazwy systematyczne
P-66.3.2 Podstawniki wywodzące się z hydrazydów
P-66.3.3 Podstawione hydrazydy
P-66.3.4 Chalkogenowe analogi hydrazydów
P-66.3.5 Hydrazydy kwasów karbonowych, cyjanowych oraz di- i polikarbonowych
P-66.3.6 Semioksamazony

P-66.3.0 Definicja

Hydrazydy są związkami pochodzącymi od organicznych oksokwasów takich jak -COOH, $-SO_2$-OH, -SO-OH itd., wskazywanymi przyrostkami, w których grupy –OH zastąpiono grupami -NH-NH_2.

P-66.3.1 Nazwy systematyczne

Hydrazydy typu R-CO-NH-NH_2 nazywa się dwiema metodami:

(1) nomenklaturą podstawnikową;
(2) modyfikując zachowane nazwy kwasów karboksylowych.

P-66.3.1.1 Nomenklatura podstawnikowa

Nazwy podstawnikowe hydrazydów tworzy się używając odpowiednich przyrostków (patrz Tabela 4.4). Metoda nazywania hydrazydów jako acylowych pochodnych hydrazyny nie jest już zalecana.

-(C)O-NH-NH_2	hydrazyd (preferowany przyrostek)
-CO-NH-NH_2	karbohydrazyd (preferowany przyrostek)
-SO_2-NH-NH_2	sulfonohydrazyd (i odpowiadające mu analogi Se i Te; preferowane przyrostki)
-SO-NH-NH_2	sulfinohydrazyd (i odpowiadające mu analogi Se i Te; preferowane przyrostki)

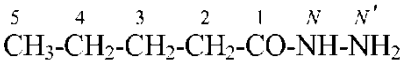
Dla nazwania acyklicznych hydrazydów przyrostek ‘hydrazyd’ jest zalecany w miejsce ‘oilohydrazyd’, w zgodzie z ogólnymi zaleceniami używania przyrostków dodawanych do nazw macierzystych wodorków, przykładowo pentanohydrazyd dla CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-CO-NH-NH_2 a nie pentanoilohydrazyd.

Przyrostek ‘hydrazyd’ jest używany w nazwach związków acyklicznych. Przyrostek ‘karbohydrazyd’ służy do określania charakterystycznej grupy –CO-NH-NH_2 dołączonej do związków pierścieniowych i łańcuchowych mających więcej niż dwie grupy charakterystyczne –CO-NH-NH_2, albo też gdy grupa taka dołączona jest do heteroatomu związku heterocyklicznego lub macierzystego. Nomenklatura multiplikacyjna może być używana w przypadkach, gdy spełnione są warunki symetrii.

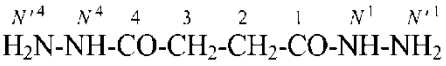
Atomy azotu w hydrazydach są identyfikowane lokantami N i N' jak w –CO-NH-NH_2,

chociaż sama hydrazyna jest numerowana lokantami liczbowymi 1 i 2, H_2N-NH_2.
W przypadku gdy dwa hydrazynowe przyrostki są dołączone do acyklicznego alkanu, przyrostek w pozycji 1 jest oznaczony N^1, N'^1, a drugi przyrostek w pozycji ‘x’ oznaczony jest jako N^x, N'^x (patrz P-16.9).

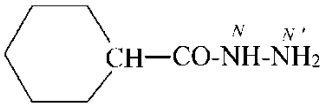
Przykłady:



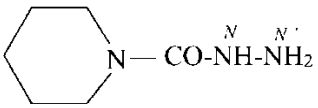
pentanohydrazyd (PIN)
(nie pentanoilohydrazyna)



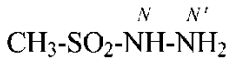
butanodihydrazyd (PIN)
sukcynohydrazyd (patrz P-66.3.1.2)
[nie (etano-1,2-diylodikarbonylo)dihydrazyd]
(nie sukcynylodihydrazyna)



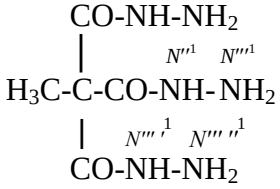
cykloheksanokarbohydrazyd (PIN)
[nie (cykloheksanokarbonylo)hydrazyna]



piperydyno-1-karbohydrazyd (PIN
[nie (piperydyno-1-karbonylo)hydrazyna]



metanosulfonohydrazyd (PIN)
[nie (metanosulfonylo)hydrazyna]

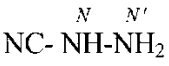


etano-1,1,1-trikarbohydrazyd (PIN)

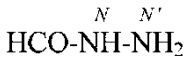
P-66.3.1.2 Nazwy tworzone przez modyfikacje zachowanych nazw kwasów karboksylowych.

Nazwy hydrazydów tworzy sie zamieniając końcówki ‘owy’ lub ‘oesowy’ w zachowanych nazwach kwasów karboksylowych na końcówkę ‘ohydrazyd’ (lokanty atomów azotu patrz P-66.3.3).

P-66.3.1.2.1 Tylko wymienionych pięć nazw należy do preferowanych nazw IUPAC i mogą być podstawione w taki sam sposób jak odpowiadające im amidy (patrz P-66.1.1.1.2). Systematyczne nazwy podstawnikowe używane są do generowania nazw kwasów modyfikowanych zamianą funkcji.

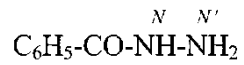


cyjanohydrazyd (PIN)
hydrazynokarbonitryl (patrz P-66.5.1.1.2)

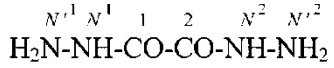


formohydrazyd (PIN)
(nie hydrazynokarboaldehyd; patrz P-66.6.1.4)

acetohydrazyd (PIN)



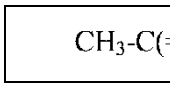
benzohydrazyd (PIN)



oksalohydrazyd (PIN)

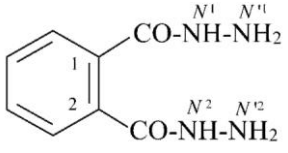
Hydrazydy analogów -imidowych i -hydrazonowych tych kwasów nazywa się systematycznie.

Przykład:

	etanoimidohydrazyd (nie acetimidohydrazyd)

P-66.3.1.2.2 W nomenklaturze ogólnej tylko nazwy furohydrazyd, ftalohydrazyd, izoftalohydrazyd i tereftalohydrazyd są zachowane, z ograniczonym podstawieniem (patrz P-66.1.1.2); odpowiadające nazwy systematyczne są preferowanymi nazwami IUPAC (patrz P-66.3.1.1). W przypadku gdy występuje dwa lub więcej przyrostków ‘karbohydrazyd’, lokantami atomów azotu są *N* i *N*′ wraz z odpowiednimi lokantami liczbowymi podanymi jako indeksy górne odpowiadające lokantom struktury macierzystej.

Przykłady:

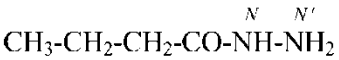


benzeno-1,2-dikarbohydrazyd (PIN)
ftalohydrazyd

benzeno-1,4-dikarbohydrazyd (PIN)
tereftalohydrazyd

P-66.3.1.2.3 Dla zachowanych nazw kwasów karboksylowych stosowanych tylko w nomenklaturze ogólnej (patrz P-65.1.1.2.1) tworzenie hydrazydów jest określone przez podaną powyżej regułę P-66.3.1.2.1, ale podstawienie jest niedozwolone, włączając w to podstawienie na atomie (-ach) azotu hydrazydowej grupy charakterystycznej. Systematyczne nazwy są preferowanymi nazwami IUPAC (patrz P-66.3.1.1).

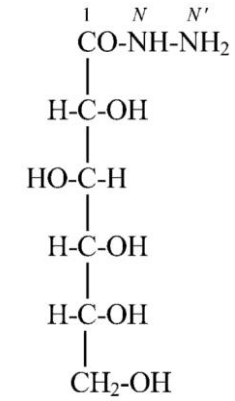
Przykład:



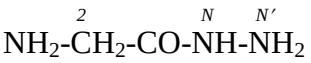
butanohydrazyd (PIN)
butyrohydrazyd
(podstawienie jest niedozwolone)

P-66.3.1.2.4 Hydrazydy pochodzące od kwasów węglowodanowych i od α-aminokwasów są omówione odpowiednio w P-102.5.6.6.2.1 i P-103.2.6.

Przykłady:



D-glukonohydrazyd



2-aminoacetohydrazyd
glicynohydrazyd

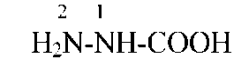
P-66.3.2 Podstawniki wywodzące się z hydrazydów

Istnieją dwa typy podstawników wywodzących się z hydrazydów: -CO-NH-NH_2, -SO_2-NH-NH_2, itd.; oraz -NH-NH-CO-R, -NH-NH-SO_2-R itd.

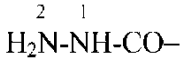
P-66.3.2.1 Podstawniki typu -CO-NH-NH_2, -SO_2-NH-NH_2 itd. można nazywać trzema metodami z wyjątkiem sytuacji, gdy grupa -CO-NH-NH_2 nie występuje na końcu łańcucha węglowego:

(1) jako grupy acylowe pochodzące od odpowiednich kwasów co daje preferowany przedrostek lub
(2) jak odpowiedni acylowy przedrostek karbonohydrazydoilowy lub też
(3) przez powiązanie, używając przedrostka hydrazynyl z karbonylem.

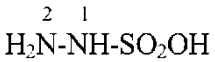
Przykłady:



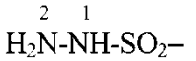
kwas hydrazynokarboksylowy (PIN)
kwas karbonohydrazydowy



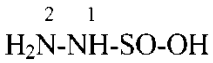
(1)hydrazynokarbonyl (preferowany przedrostek)
(2) karbonohydrazydoil (patrz P-65.2.1.4)
(3) hydrazynylokarbonyl



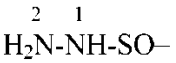
kwas hydrazynosulfonowy (PIN)



(1) hydrazynosulfonyl (preferowany przedrostek, patrz P-65.3.2.2.2)
(3) hydrazynylosulfonyl



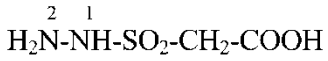
kwas hydrazynosulfinowy (PIN)



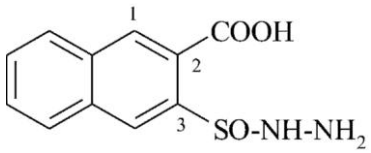
(1) hydrazynosulfinyl (preferowny przedrostek: patrz P-65.3.2.2.2)
(3) hydrazynylosulfinyl

Sposób pierwszy prowadzi do przedrostków preferowanych.

Przykłady:



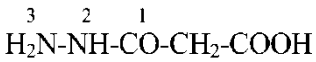
kwas (hydrazynosulfonylo)octowy (PIN)
kwas (hydrazynylosulfonylo)octowy



kwas 3-(hydrazynosulfinylo)naftaleno-2-karboksylowy (PIN)
kwas 3-(hydrazynylosulfinylo)naftaleno-2-karboksylowy

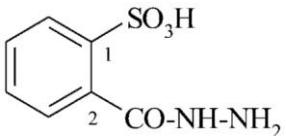
P-66.3.2.2 Jeśli grupa –CO-NH-NH_2 występuje na końcu łańcucha, użycie przedrostków ‘hydrazynylo’ i ‘okso’ generuje preferowaną nazwę IUPAC.

Przykłady:



kwas 3-hydrazynylo-3-oksopropanowy (PIN)

kwas (hydrazynokarbonylo)octowy
kwas karbonohydrazydoilooctowy



kwas 2-(hydrazynokarbonylo)benzeno-1-sulfonowy (PIN)
kwas 2-karbonohydrazydoilobenzeno-1-sulfonowy

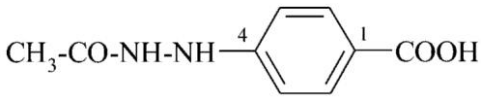
P-66.3.2.3 Jeśli obecna jest grupa mająca priorytet do wymieniania jako główna grupa charakterystyczna, grupa hydrazydowa typu R-CO-NH-NH- lub R-SO_2-NH-NH- (lub selenowe albo też tellurowe analogi tych grup) nazywa się:

(1) wyrażając odpowiedni hydrazyd jako przedrostek, czyli dodając do słowa hydrazyd litery ‘o’, przykładowo’acetohydrazydo’, propanohydrazydo’, i ‘benzenokarbohydrazydo’; przy czym lokant *N* wskazuje atom azotu dołączony do grupy -CO-.

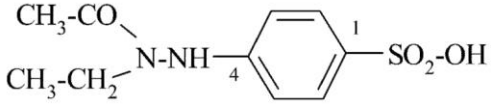
(2) jako podstawnik acylohydrazynylowy; grupa hydrazynylowa jest numerowana lokantami cyfrowymii ‘1’ i ‘2’ przy czym lokant ‘1’ ma atom azotu przyległy do wolnej walencyjności.

Metoda (1) generuje preferowane nazwy IUPAC.

Przykłady:



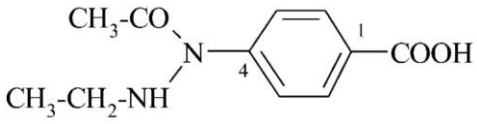
(1) kwas 4-(acetohydrazydo)benzoesowy (PIN)
(2) kwas 4-(2-acetylohydrazyn-1-ylo)benzoesowy
(3)



(1) kwas 4-(*N*-etyloacetohydrazydo)benzeno-1-sulfonowy (PIN)
(2) kwas (2-acetylo-2-etylohydrazyn-1-ylo)benzeno-1-sulfonowy

Grupy R-CO-N(NH_2)- , -SO_2N(NH_2)- są nazywane jako podstawione pochodne grupy ‘hydrazynylowej’ z lokantami cyfrowymi. Metoda ta prowadzi do preferowanych przedrostków.

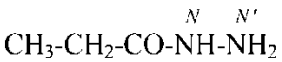
Przykład:



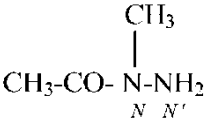
kwas 4-(1-acetylo-2-etylhydrazyn-1-ylo)benzoesowy (PIN)

P-66.3.3 Podstawione hydrazydy

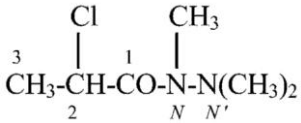
P-66.3.3.1 Podstawniki alkil, aryl, cykloalkil itd. na atomie azotu w hydrazydach są opisywane nazwami w przedrostku i lokantami '*N*' dla -NH- oraz '*N′*' dla -NH_2 jak to przedstawiono poniżej. Lokanty '1' i '2' były w przeszłosci używane dla nazwania hydrazydów jako pochodnych hydrazyny i nie są one obecnie rekomendowane. Preferowanymi nazwami IUPAC są nazwy hydrazydów z użyciem lokantów '*N*1 '*N*′.



Przykłady:



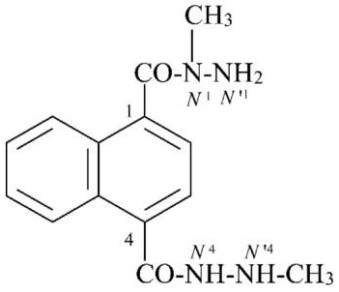
N-metyloacetohydrazyd (PIN)
(nie 1-acetylo-1-metylohydrazyna)



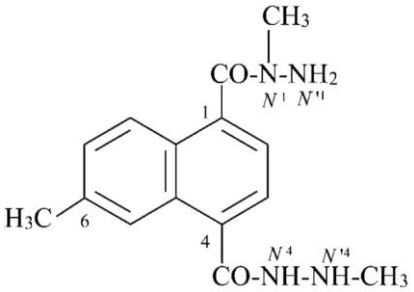
2-chloro-*N*,*N*′,*N*′-trimetylopropanohydrazyd (PIN)
[nie 1-(2-chloropropanoilo)-1,2,2-trimetylohydrazyna]

P-66.3.3.2 W przypadku obecności dwóch grup hydrazydowych, każda z nich jest identyfikowana lokantami *N*, i *N*′. Dla rozróżnienia czterech atomów azotu, cyfrowy lokant odpowiadający pozycji w strukturze macierzystej do której atom azotu jest dołączony jest dodawany jako superskrypt po literowym lokancie *N* lub *N*′ na przykład, N^1, N'^1 itd. (patrz również P-62.2.1.2.2)

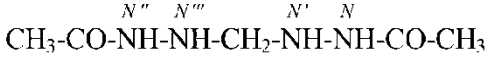
Przykłady:



N^1,N^4-dimetylonaftaleno-1,4-dikarbohydrazyd (PIN)
(numeracja oparta jest na zasadzie niższego zbioru lokantów; ponieważ N^1 jest niższy od N'^1; to i zbiór N^1,N'^4 jest niższy od *N*′,N^4)



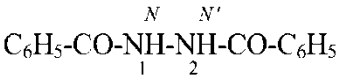
N^1,N'^4,6-trimetylonaftaleno-1,4-dikarbohydrazyd (PIN)
(numeracja oparta jest na zasadzie niższego zbioru lokantów
dla wszystkich trzech podstawników, bowiem ‘1,4,6’ jest niższy od ‘1,4,7’)



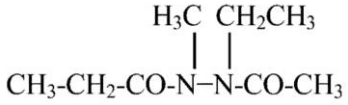
N',N'''-metylenodiacetohydrazyd (PIN, nazwa multiplikacyjna)

P-66.3.3.3 Acylowe, diacylowe i triacylowe pochodne hydrazydów nazywa się przez podstawienie odpowiednią grupą acylową mającego starszeństwo hydrazydu (starszy hydrazyd wywodzi się od najstarszego rangą kwasu). Nazwy oparte o podstawienie macierzystego wodorku jakim jest ‘hydrazyna’ nie są już rekomendowane nawet w nomenklaturze ogólnej. Hydrazyna, zachowana nazwa, ma pierwszeństwo przed nazwą ‘diazan’ w preferowanych nazwach IUPAC.

Przykłady:



N'-benzoilobenzohydrazyd (PIN)
(nie 1,2-dibenzoilohydrazyna)



N'-acetylo-N'-etylo-N-metylopropanohydrazyd (PIN)
(nie 1-acetylo-1-etylo-2-metylo-2-propanoilohydrazyna)

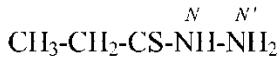
P-66.3.4 Chalkogenowe analogi hydrazydów

Chalkogenowe analogi hydrazydów nazywa się podstawnikowo używając przyrostki tworzone w nomenklaturze zamiennej funkcji, na przykład, ‘tiohydrazyd’, ‘karbotiohydrazyd’, ‘sulfonotiohydrazyd’, itd. (jak to opisano w P-33.2.2 i Tabeli 4.4)

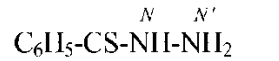
Poniżej wymienione metody nie są już zalecane:

(a) podstawienie hydrazyny odpowiednimi modyfikowanymi grupami acylowymi;
(b) modyfikowanie zachowanych nazw przedrostkami ‘tio’, ‘seleno’, telluro’.

Przykłady:



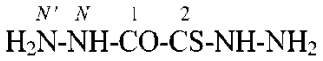
propanotiohydrazyd (PIN)



benzenokarbotiohydrazyd (PIN)

[nie (propanotioilo)hydrazyna
ani nie (tiopropanoilo)hydrazyna]

[nie (benzenokarbotioilo)hydrazyna
ani nie (tiobenzoilo)hydrazyna]

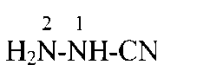


2-hydrazynylo-2-sulfanylidenoacetohydrazyd (PIN)
(nie dihydrazyd tioszczawiowy)

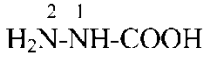
P-66.3.5 Hydrazydy kwasów karbonowego, cyjanowego oraz kwasów di- i polikarbonowych

P-66.3.5.1 Preferowane nazwy IUPAC hydrazydów pochodnych kwasów karbonowego i cyjanowego wybiera się zgodnie z kolejnością starszenstwa klas.

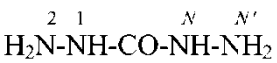
Przykłady:



cyjanohydrazyd (PIN)
[kwas cyjanowy jest nazwą zachowaną (patrz P-65.2.2)]
hydrazyd karbonitrydowy
hydrazynokarbonitryl



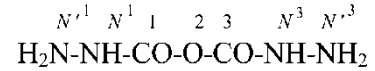
kwas hydrazynokarboksylowy (PIN)
kwas karbonohydrazydowy



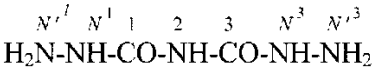
hydrazynokarbohydrazyd (PIN)
dihydrazyd karbonowy

P-66.3.5.2 Nazwy hydrazydów wywodzących się z kwasów di- i polikarbonowych tworzy się dodając nazwę klasy funkcyjnej ‘hydrazyd’ do nazwy odpowiedniego kwasu, poprzedzonej, jeśli to potrzebne, przedrostkiem zwielokrotniającym ‘di’ wyrażającym krotność grup hydrazydowych. Analogi chalkogenowe i inne analogi zamienne opisuje się za pomocą przedrostków zamiennych funkcji.

Przykłady:



dihydrazyd dikarbonowy (PIN)
[(hydrazynokarbonylo)oksy]formohydrazyd



dihydrazyd 2-imidodikarbonowy (PIN)
[(hydrazynokarbonylo)amino]formohydrazyd

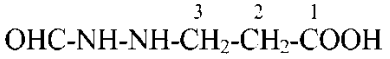
P-66.3.5.3 Odpowiednie podstawniki

W obecności grupy mającej priorytet do wymieniania jako główna grupa charakterystyczna, grupa hydrazydowa jest nazywana następująco:

(1) jako związek acylohydrazynylowy, w którym grupa hydrazydowa jest numerowana lokantami liczbowymi 1 i 2;
(2) wskazując odpowiedni hydrazyd podstawnikowo w przedrostku, dodając literę ‘o’ po nazwie hydrazydu.

Metoda (2) generuje preferowane nazwy IUPAC.

Przykłady:



kwas 3-(formohydrazydo)propanowy (PIN)
kwas 3-(2-formylohydrazyn-1-ylo)propanowy

kwas 4-{[(hydrazynokarbonylo)oksy]formohydrazydo}butanowy (PIN)
kwas 4-(2-{[(hydrazynokarbonylo)oksy]karbonylo}hydrazyn-1-ylo)butanowy

kwas hydrazynokarbohydrazydootowy (PIN)
kwas [2-(hydrazynokarbonylo)hydrazyn-1-ylo]octowy
kwas [2-(hydrazynylokarbonylo)hydrazyn-1-ylo]octowy

P-66.3.6 Semioksoamazony

Semioksoamazony mają ogólną strukturę R=N-NH-CO-CO-NH_2. Są one hydrazydami kwasu oksamowego. Ich preferowane nazwy IUPAC oparte są na macierzystej nazwie acetamidu, ale mogą być również nazywane jako pochodne hydrazydu kwasu oksamowego.

Przykład:

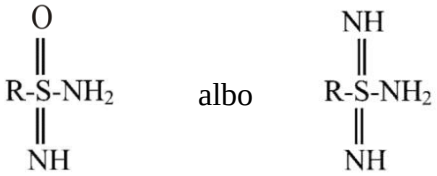
2-(benzylidenohydrazynylo)-2-oksoacetamid (PIN)
hydrazyd *N′*-benzylidenooksamowy

P-66.4 AMIDYNY, AMIDRAZONY, HYDRAZYDYNY I AMIDOOKSYMY (OKSYMY AMIDÓW)

P-66.4.1 Amidyny
P-66.4.2 Amidrazony
P-66.4.3 Hydrazydyny
P-66.4.4 Amidoksymy (oksymy amidów)

P-66.4.1 Amidyny

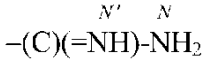
Związki o strukturze ogólnej R-C(=NH)-NH_2 rodzajowo są znane jako ’karboksyamidyny’ natomiast te mające ogólną strukturę R-S(=NH)-NH_2 są znane jako ‘sulfinoamidyny’. Związki o strukturach przedstawionych poniżej są znane tylko jako ‘sulfonoimidoamidy’ i nie są ‘amidynami’.



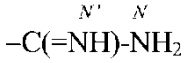
P-66.4.1.1 Przyrostki dla amidyn
P-66.4.1.2 Amidyny kwasów karbonowych oraz di-i polikarbonowych
P-66.4.1.3 Przedrostki dla amidynowej grupy charakterystycznej
P-66.4.1.4 Podstawione amidyny
P-66.4.1.5 Disulfidy formamidyn
P-66.4.1.6 Diamidydy

P-66.4.1.1 Przyrostki dla amidyn

Amidyny nazywa się tak jak amidy zgodnie z nomenklaturą zamienną funkcji, w której atom =O jest zastąpiony grupą =NH. Jako główna grupa charakterystyczna określa się je przyrostkami '-imidoamid' oraz '-karboksyimidoamid'. Lokantem dla grupy $-NH_2$ jest *N* a dla grupy iminowej *N′*. Przyrostki '-amidyna' i '-karboksyamidyna' nie są już zalecane.

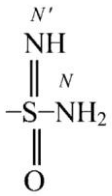


-imidoamid (preferowany przyrostek)

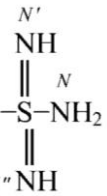


-karboksyimidoamid (preferowany przyrostek)

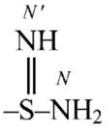
Przyrostki dla analogów sulfonowych i sulfinowych oraz ich selenowych i tellurowych odpowiedników nazywa się w podobny sposób. W przypadku 'sulfonodiimidoamidów' i analogów, lokantem dla drugiej grupy 'imido' jest *N″*.



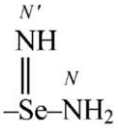
-sulfonoimidoamid
(wstępnie wybrany przyrostek)



-sulfonodiimidoamid
(wstępnie wybrany przyrostek)

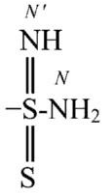


-sulfinoimidoamid
(wstępnie wybrany przyrostek)



selenonoimidoamid
(wstępnie wybrany przyrostek)

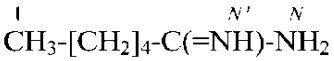
Przyrostki dla grup zawierających atomy S, Se lub Te w miejsce atomu tlenu grupy sulfonoimidoamidowej nazywa się metodą zamienną funkcji , na przykład:



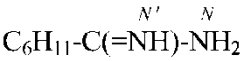
-sulfonoimidotioamid (wstępnie wybrany przyrostek)

Przyrostek ‘-imidoamid’używany jest do wskazania acyklicznej amidyny mającą jedną terminalną charakterystyczną grupę amidynową; dwie terminalne grupy charakterystyczne amidynowe przy acyklicznym macierzystym wodorku określa się za pomocą przyrostka ‘diimidoamid’. Wszystkie inne przyrostki używane są do nazwania acyklicznych poliamidyn i wszystkich amidyn, w nazwie których przyrostek występuje po cyklicznym macierzystym wodorku i po heteroatomie macierzystego heterocyklicznego wodorku.

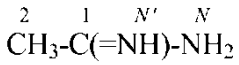
Nazwy zachowane amidyn tworzy się zastępując końcówki ‘amid’ w nazwach amidów końcówką ‘imidoamid’, ale nie są to preferowane nazwy IUPAC; preferowane nazwy IUPAC tworzy się systematycznie. W innych przypadkach, kryteria nomenklaturowe dla amidów zostały zaadoptowane w nazwach amidyn; stąd nazwy amidyn wywodzą się z preferowanych nazw amidów. Nazwy niepodstawionych amidyn tworzy się z nazw niepodstawionych amidów.
Przykłady:



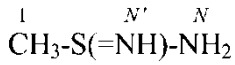
heksanoimidoamid (PIN)
(już nie heksanoamidyna)



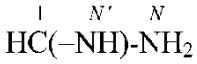
cykloheksanokarboksyimidoamid (PIN)
(już nie cykloheksanokarboksyamidyna)



etanoimidoamid (PIN)
acetoimidoamid
(już nie acetoamidyna)



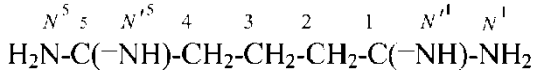
metanosulfinoimidoamid (PIN)
(już nie metanosulfinoamidyna)



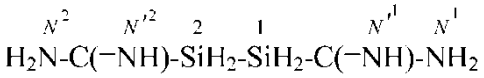
metanoimidoamid
formimidoamid
(już nie formamidyna)

Literowe lokanty ‘*N* ’, ‘*N′* ’itd. z cyframi w indeksie górnym używane są do różnicowania atomów azotu w ‘diimidoamidach’.

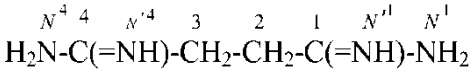
Przykłady:



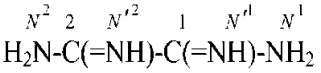
pentanodiimidoamid (PIN)
(już nie pentanodiamidyna)



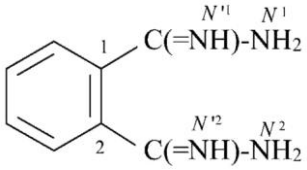
disilano-1,2-dikarboksyimidoamid (PIN)
(już nie disilano-1,2-dikarboksyamidyna)



butanodiimidoamid (PIN)
sukcynoimidoamid

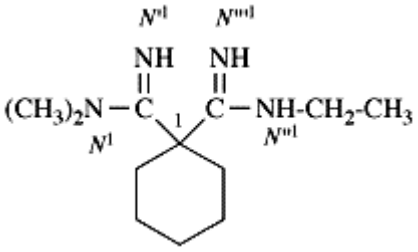


etanodiimidoamid (PIN)
oksaloimidoamid



benzeno-1,2-dikarboksyimidoamid (PIN)
ftaloimidoamid

benzeno-1,4-dikarboksyimidoamid (PIN)
tereftalimidoamid
(już nie benzeno-1,4-dikarboksyamidyna)

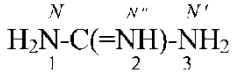


N''^1-etylo-N^1,N^1-dimetylocykloheksano-1,1-dikarboksyimidoamid (PIN)

P-66.4.1.2 Amidyny kwasu karbonowego i kwasów di- i polikarbonowych

P-66.4.1.2.1 Guanidyna i jej pochodne

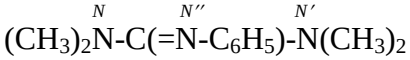
P-66.4.1.2.1.1 Preferowaną nazwą IUPAC dla amidyny, pochodnej kwasu karbonowego, H_2N-C(=NH)-NH_2, jest nazwa zachowana ‘guanidyna’; w preferowanych nazwach IUPAC używane są lokanty *N*, *N′*, *N″*. Dawniej używane lokanty 1, 2 i 3 obecnie nie są zalecane nawet w ogólnej nomenklaturze.



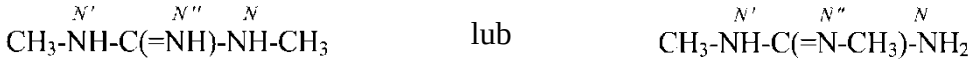
Systematyczną nazwę zamienną funkcji ‘diamid karbonoimidowy’ można stosować w ogólnej nomenklaturze.

P-66.4.1.2.1.2 Pochodne hydrokarbylowe nazywa się jako podstawione guanidyny. Jeśli miejsce wiązania podwójnego nie jest znane, preferowane nazwy IUPAC mają jak najmniejszą liczbą primów.

Przykłady:



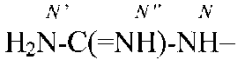
N,*N*,*N*′, *N*′-tetrametylo-*N*′′-fenyloguanidyna (PIN)
diamid *N*,*N*,*N*′, *N*′-tetrametylo-*N*′′-fenylokarbonoimidowy



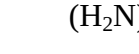
N,*N*′-dimetyloguanidyna (PIN)
(nie *N*,*N*′′-dimetyloguanidyna)
diamid *N*,*N*′′-dimetylokarbonoimidowy

P-66.4.1.2.1.3 W przypadku obecności grup charakterystycznych starszych względem guanidyny zgodnie z porządkiem starszeństwa klas (patrz P-41.2), stosuje się podane niżej przedrostki. Przedrostek ‘guanidyno-’ nie jest już obecnie zalecany.

W preferowanych nazwach IUPAC nie stosuje się już przedrostka ‘guanidyno-‘; zalecanym przedrostkiem jest ‘karbamoimidoiloamino-‘.

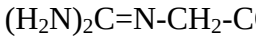


karbamoimidoiloamino (preferowany przedrostek)
karbamoimidoamido
[amino(imino)metylo)]amino
(nie guanidyno)

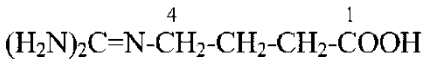


(diaminometylideno)amino
(preferowany przedrostek)

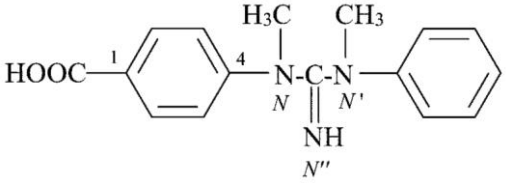
Przykłady:



N-(diaminometylideno)glicyna
kwas [(diaminometylideno)amino]octowy

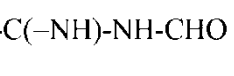


kwas 4-[(diaminometylideno)amino]butanowy (PIN)

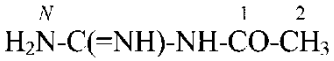


kwas 4-[metylo(*N*-metylo-*N*-fenylokarbamoimidoilo)amino]benzoesowy (PIN)
kwas 4-({imino[metylo(fenylo)amino]metylo}metyloamino)benzoesowy
kwas 4-(*N*,*N*′-dimetylo-*N*′-fenylokarbamoimidoamido)benzoesowy

N-karbamoimidoiloformamid (PIN)
N-[amino(imino)metylo]formamid
(nie *N*-formyloguanidyna)



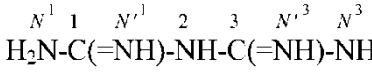
karbamoimidoilomocznik (PIN)
N-[amino(imino)metylo]mocznik
(nie *N*-karbamoiloguanidyna)



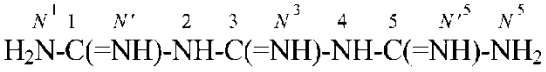
N-karbamoimidoiloacetamid (PIN)
N-(*C*-aminokarbonoimidoilo)acetamid
N-[amino(imino)metylo]acetamid
(nie *N*-acetyloguanidyna)

P-66.4.1.2.2 Skondensowane guanidyny

Nazwy: biguanid, triguanid, itd., nie są już zalecane. Skondensowane guanidyny, H_2N-[C(=NH)-NH]$_n$-H, gdzie n=2, 3 lub 4 nazywa się jako diamidy kwasu imidodikarbonoimidowego, kwasu diimidotrikarbonoimidowego oraz kwasu triimidotetrakarbonoimidowego. Do wskazania pozycji podstawników stosuje się lokanty jak poniżej.

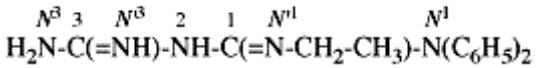


diamid imidodikarbonoimidowy (PIN)



diamid diimidotrikarbonoimidowy (PIN)

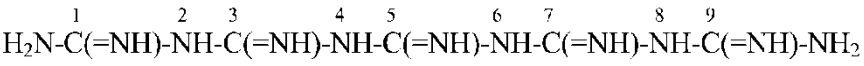
Przykład:



diamid *N*′^{1}-etylo-*N*^{1},*N*^{1}-difenyloimidodikarbonoimidowy (PIN)

Preferowane nazwy IUPAC poliguanidyn, w których n=5 lub więcej, tworzy się stosując nomenklaturę zamienną ‘a’ szkieletu.

Przykład:



3,5,7-triimino-2,4,6,8-tetraazanonano-1,9-diimidoamid (PIN)

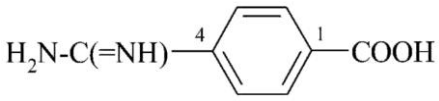
P-66.4.1.3 Przedrostki określające grupę charakterystyczną amidyny

P-66.4.1.3.1 Systematyczną nazwą grupy –C(=NH)-NH_2 jest ‘karbamoimidoil’; jest to nazwa grupy acylowej pochodzącej od nazwy kwasu karbamoimidowego HO-C(=NH)-NH_2 i jest

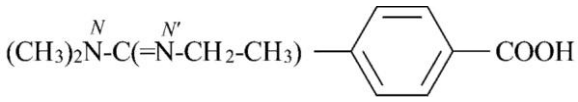
preferowanym przedrostkiem IUPAC. Przedrostek ‘amidyno’ nie jest już zalecany. W grupie acylowej lokant *N* jest używany do wskazania grupy $–NH_2$, a *N'* do oznaczenia grupy =NH.

> W nomenklaturze IUPAC nie stosuje się już przedrostka ‘amidyno’; zalecanym przedrostkiem jest teraz ‘karbamoimidoil’ zarówno w preferowanych nazwach IUPAC jak i w ogólnej nomenklaturze.

Przykłady:



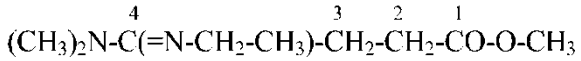
kwas 4-karbamoimidoilobenzoesowy (PIN)
kwas 4-[amino(imino)metylo]benzoesowy
(nie: kwas 4-amidynobenzoesowy)



kwas 4-(*N'*-etylo-*N*,*N*-dimetylokarbamoimidoilo)benzoesowy (PIN)
kwas 4-[(dimetyloamino)(etyloimino)metylo)]benzoesowy
(nie: kwas 4-(*N'*-etylo-*N*,*N*-dimetyloamidyno)benzoesowy)

P-66.4.1.3.2 Jeśli atom węgla grupy H_2N-C(=NH)- znajduje się na końcu łańcucha, to grupy $–NH_2$ i =NH są określane przedrostkami , odpowiednio: ‘amino’ i ‘imino’.

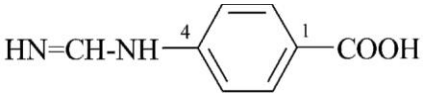
Przykład:



4-(dimetyloamino)-4-(etyloimino)butanian metylu
(nie: 3-[C-dimetyloamino)-*N*-etylokarbonoimidoilo]propanian metylu)
(nie: 3-(N^2-etylo-N^1,N^1-dimetyloamidyno)propionian metylu

P-66.4.1.3.3 Podstawnik HN=CH-NH- jest nazywany ‘metanoimidoamido-’; może być również nazywany jako zespolony przedrostek podstawnika ‘formimidoiloamino-’ lub kompleksowy przedrostek podstawnika ‘(iminometylo)amino-’. Przedrostek ‘metanoimidoamido’ jest zalecany w nomenklaturze IUPAC. Podstawnik H_2N-CH=N- można nazywać tylko jako kompleksowy podstawnik ‘(aminometylideno)amino-’

Przykład:



kwas 4-metanoimidoamidobenzoesowy (PIN)
kwas 4-[(iminometylo)amino]benzoesowy
kwas 4-(formimidoiloamino)benzoesowy

P-66.4.1.3.4 Nazwy przedrostków odpowiadające przyrostkom: sulfonoimidoamid, sulfinoimidoamid i ich selenowych i tellurowych analogów tworzy się systematycznie przez powiązanie przedrostka ‘amino-’ z nazwą odpowiedniej grupy acylowej:

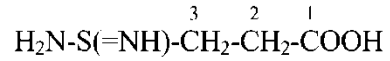
–S(O)(=NH)-NH_2 -S(=NH)$_2$-NH_2

S-aminosulfonoimidoil (preferowany przedrostek) *S*-aminosulfonodiimidoil (preferowany przedrostek)

-S(=NH)-NH_2 *S*-aminosulfinimidoil (preferowany przedrostek)

Uwaga: Kursywa lokantu '*S*' jest zastosowana dla uniknięcia potencjalnej niejasności odnośnie podstawienia na imidowym atomie azotu.

Przykład:



kwas 3-(*S*-aminosulfinimidoilo)propanowy (PIN)

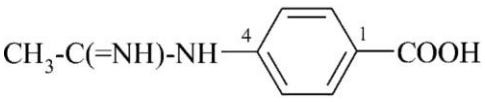
P-66.4.1.3.5 W przypadku obecności grupy charakterycznej wymienionej jako przyrostek, nazwy grup R-C(=NH)NH- lub R-S(O)(=NH)NH- i ich analogów selenowych i tellurowych tworzy się na dwa sposoby .

(1) podstawnikowo, używając przedrostki utworzone przez dodanie litery 'o' na końcu pełnej nazwy amidu. Nazwy przyrostków 'imidoamid', 'karboksyimidoamid' zmienia się na 'imidoamido', karboksyimidoamido' lub też 'sulfonoimidoamid' zmienia się na 'sulfonoimidoamido', itd.

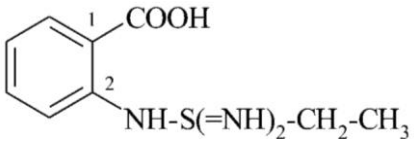
(2) podstawnikowo, przez użycie przedrostka 'acyloamino' utworzonego przez wstawienie odpowiedniej nazwy grupy acylowej przed podstawnikiem 'amino'.

Preferowane przedrostki IUPAC tworzy się zgodnie z metodą (1).

Przykłady:



kwas 4-(acetoimidoiloamino)benzoesowy
kwas 4-acetoimidoamidobenzoesowy



kwas 2-(etanosulfonodiimidoamido)benzoesowy (PIN)
kwas 2-(etanosulfonodiimidoiloamino)benzoesowy

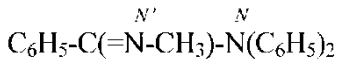
P-66.4.1.4 Podstawione amidyny

P-66.4.1.4.1 Nazwy *N*-podstawionych amidyn tworzy się dodając nazwę odpowiedniego podstawnika w formie przedrostka do nazw niepodstawionych imidoamidów, stosując dodatkowo *N* i *N′* jako lokanty. Jeżeli w nazwie występuje przyrostek oznaczający jedną grupę imidoamidową, to lokant *N* odnosi się do grupy aminowej, a lokant *N′* do grupy iminowej. Lokanty *N* i *N′* z liczbą w

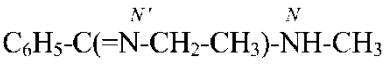
indeksie górnym np. N^1 lub N'^2, używa się wówczas, gdy przyrostek wyraża obecność dwóch lub wiecej grup imidoamidowych. Ze względu na tautomeryzację lokanty *N*, *N'*, itd. stosuje się w przypadku, gdy tylko jeden podstawnik przypada na każdą grupę imidoamidową.

> Lokanty *N* i *N'* używa się w odniesieniu do grup odpowiednio NH_2 i NH w amidynach, w miejsce stosowanych w myśl zaleceń z 1979 r. (odn.1) lokantów N^1 i N^2.

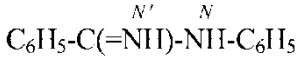
Przykłady:



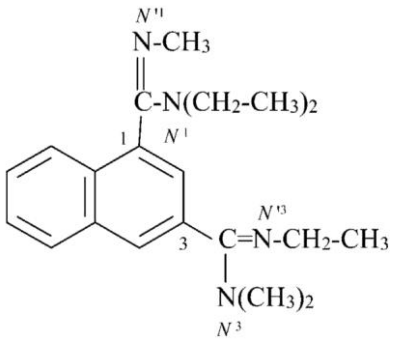
N'-metylo-*N*,*N*-difenylobenzeno-1-karboksyimidoamid (PIN)
(nie: *N'*-metylo-*N*,*N*-difenylobenzenokarboksyamidyna)



N'-etylo-*N*-metylobenzenokarboksyimidoamid (PIN)
(nie: *N'*-etylo-*N*-metylobenzenokarboksyamidyna)



N-fenylobenzenokarboksyimidoamid (PIN)
(nie: *N*-fenylobenzenokarboksyamidyna; ani: benzoimidoanilid)

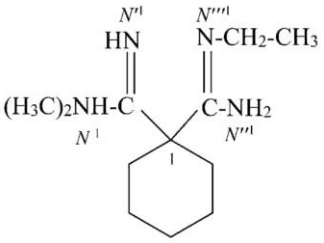


N^1,N^1,N'^3-trietylo-N'^1,N^3,N^3-trimetylonaftaleno-1,3-dikarboksyimidoamid (PIN)

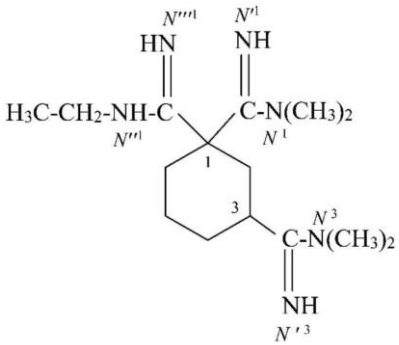
P-66.4.1.4.2 Geminalne grupy karboksyamidynowe

W przypadku obecności geminalnych grup karboksyamidynowych stosuje się lokanty *N*, *N'*, *N''*, *N'''*. Najniższe lokanty przypisuje się grupom najbardziej podstawionym. Jeśli istnieje wybór, najniższy lokant otrzymuje pierwszy wymieniony w nazwie *N*-podstawnik. Dla poliamidyn z co najmniej jedną parą geminalnych grup amidynowych, górny liczbowy indeks lokantu określa pozycję grupy amidynowej w łańcuchu lub pierścieniu. System *N*-lokantów z liczbowym indeksem górnym jest zalecany również dla dwupodstawionych amin (patrz P-62.2.4.1) oraz dwupodstawionych amidów (patrz P-66.1.1.3.1.2).

Przykłady:



N'''^{1}-etylo-*N*^{1},*N*^{1}-dimetylocykloheksano-1,1-dikarboksyimidoamid (PIN)



N''^{1}-etylo-*N*^{1},*N*^{1},*N*^{3},*N*^{3}-tetrametylocykloheksano-1,1,3-trikarboksyimidoamid (PIN)

P-66.4.1.5 Disulfidy formamidyny

Związek o wzorze H_2N-C(=NH)-S-S-C-(=NH)-NH_2 i jego pochodne poprzednio nazywano na podstawie macierzystej struktury, ‘disulfidu formamidyny’. Obecnie ich nazwy wywodzą się od macierzystego związku ‘kwasu dikarbonowego’ lub jako ditioperoksyanhydrydy, które są preferowanymi nazwami IUPAC.

Przykład:

$$\overset{N^1}{CH_3}\text{-}\overset{}{CH_2}\text{-}\overset{}{NH}\text{-}\overset{N'^1}{C}(=NH)\text{-}\overset{1}{S}\text{-}\overset{2}{S}\text{-}\overset{N'^2}{C}(=NH)\text{-}\overset{N^2}{NH}\text{-}CH_3$$

ditioperoksyanhydryd *N*-etylokarbamoimidowo-*N*-metylokarbamoimidowy (PIN)
[nie *N*^{1}-etylo-*N*^{2}-metylodisulfanodikarboksyimidoamid;
nie diamid *N*-etylo-*N''*-metylo(ditioperoksy)dikarbonoimidowy;
nie *N*^{1}-etylo-*N*^{2}-metylo-α,α'-ditiobisformamidyna (patrz C-951.5 w odn.1)]

Uwaga: W porządku starszeństwa anhydryd jest starszą klasą (patrz P-41).

P-66.4.1.6 Diamidydy

Diamidydy są analogami acyklicznych anhydrydów karboksylowych, w których atomy =O zastąpione zostały przez grupy =NR, a anhydrydowy atom tlenu przez grupę -NR-, co daje ogólny wzór R-C(=NR')-N(R)-C"(=NR'")-R"". Preferowane nazwy IUPAC tworzy się zgodnie z zasadami nomenklatury systematycznej jak dla *N*-imidoiloimidoamidów.

Przykład:

$$CH_3\text{-}\overset{N}{C}(=NH)\text{-}\overset{1}{NH}\text{-}\overset{N'}{C}(=NH)\text{-}CH_3$$

N-etanoimidoiloetanoimidoamid (PIN)
N-acetimidoiloacetoimidoamid

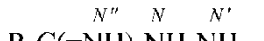
N-(1-iminoetylo)etanoimidoamid

P-66.4.2 Amidrazony

P-66.4.2.1 Przyrostki wyrażające amidrazony

Związki o wzorze ogólnym R-C(NH_2)=N-NH_2 lub ich tautomeryczne struktury R-C(=NH)-NH-NH_2 mają nazwę klasową ‘amidrazony’ i nazywa się je podstawnikowo z użyciem przyrostków ‘hydrazonoamid’ lub ‘karbohydrazonoamid’ oraz ‘imidohydrazyd’ lub ‘karboksyimidohydrazyd’. Jeśli pozycja wiązania podwójnego jest znana, to *N*-podstawione grupy wskazuje się następującymi lokantami:

dla karbohydrazonoamidów

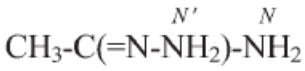
dla karboksyimidohydrazydów 

W preferowanych nazwach IUPAC używa się lokantów *N*, *N′*, *N″* jak pokazano powyżej. Według poprzedniej metody, obecnie nie zalecanej, nazywano amidrazony ‘hydrazonami amidów’, ‘imidami hydrazydów’ lub, jeśli struktura była nieznana, ‘amidrazonami’.

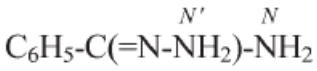
Jeśli pozycja wiązania podwójnego jest nieznana, ‘karbohydrazonoamid’ wybiera się jako starszą grupę charakterystyczną dla wskazania struktury tautomerycznej, a odpowiednie lokanty *N* lub *N′* oznaczają pozycję podstawienia. Jeśli pozycja podstawienia przyrostka musi być określona w nazwie, to lokanty wskazujące pozycję przyrostków znajdują się w indeksie górnym przy odpowiednim *N* lokancie.

Nazwy zachowane amidrazonów tworzy się zastępując końcówki ‘amid’ w nazwach amidów przez ‘ohydrazonoamid’, i stosuje się je tylko w ogólnej nomenklaturze. Preferowane nazwy IUPAC dla amidrazonów tworzy się zgodnie z regułami przyjętymi dla nazw systematycznych. W innych przypadkach reguły nomenklaturowe dla amidów można stosować do amidrazonów; stąd też preferowane nazwy amidrazonów odpowiadają preferowanym nazwom amidów. Nazwy niepodstawialnych amidów generują niepodstawialne amidrazony.

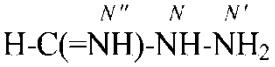
Przykłady:



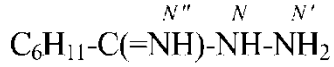
etanohydrazonoamid (PIN)



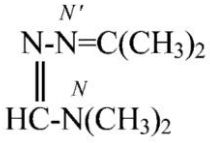
benzenokarbohydrazonoamid (PIN)



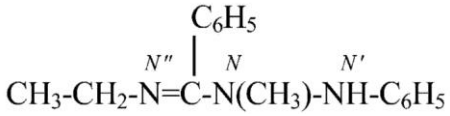
metanoimidohydrazyd (PIN)



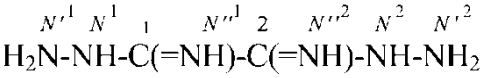
cykloheksanokarboksyimidohydrazyd (PIN)



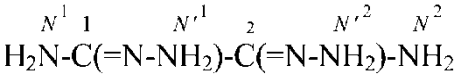
N,*N*-dimetylo-*N′*-(propan-2-ylideno)metanohydrazonoamid (PIN)
N,*N*-dimetylo-*N′*-izopropylidenoformohydrazonoamid
(nie izopropylidenohydrazon *N*,*N*-dimetyloformamidu)



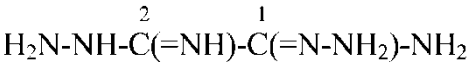
N″-etylo-*N*-metylo-*N′*-fenylobenzenokarboksyimidohydrazyd (PIN)
N″-etylo-*N*-metylo-*N′*-fenylobenzoimidohydrazyd
(nie etyloimid N^1-metylo-N^2-fenylobenzohydrazydu)



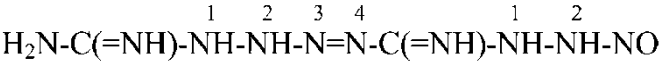
etanodimidohydrazyd (PIN)



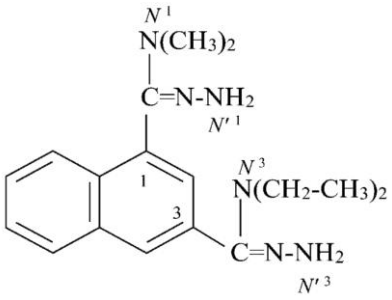
etanodihydrazonoamid (PIN)



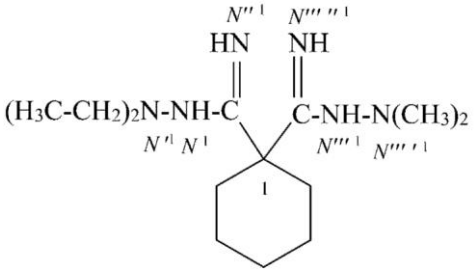
2-hydrazynylo-2-iminoetanohydrazonoamid (PIN)



4-(2-nitrozohydrazyno-1-karbonoimidoilo)tetraaz-3-eno-1-karboksyimidoamid (PIN)
[imidoamid (amidyna) jest starszy względem imidohydrazydu (amidrazonu) zgodnie z porządkiem starszeństwa]



N^3,N^3-dietylo-N^1, N^1-dimetylonaftaleno-1,3-dikarbohydrazonoamid (PIN)



N′¹,*N*′¹-dietylo-*N*‴ ′¹,*N*‴ ′¹-dimetylocykloheksano-1,1-dikarboksyimidohydrazyd (PIN)

Uwaga: Lokanty *N, N*′ itp. w połaczeniu z lokantami liczbowymi, patrz P-16.9, P-62.2.4.1.2 i P-66.4.1.4.2).

Amidrazony pochodne kwasu sulfonowego, sulfinowego oraz kwasów pokrewnych nazywa się zgodnie z tymi samymi zasadami.

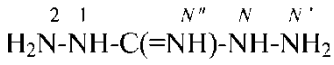
Przykład:

C_6H_5-S(=NNH_2)-NH_2
benzenosulfinohydrazonoamid (PIN)

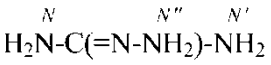
P-66.4.2.2 Amidrazony kwasu karbonowego, kwasów di- i polikarbonowych

Ogólna metodologia omówiona w P-65.2 stosowana jest do tworzenia nazw amidrazonów pochodnych kwasu karbonowego, kwasów di- i polikarbonowych.

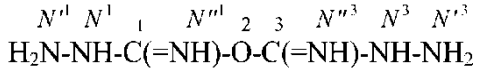
Przykłady:



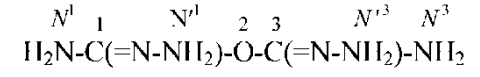
hydrazynokarboksyimidohydrazyd (PIN)
dihydrazyd karbonoimidowy



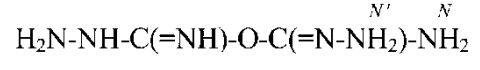
diamid karbonohydrazonowy (PIN)



dihydrazyd dikarbonoimidowy (PIN; patrz P-65.2.3.1)
(nie dihydrazyd 1,3-diimidodikarbonowy)



diamid dikarbonohydrazonowy (PIN; patrz P-65.2.3.1)
(nie diamid 1,3-dihydrazonodikarbonowy)

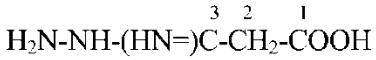


[(hydrazynokarboksyimidoil)oksy]metanohydrazonoamid (PIN)
[(karbamohydrazonoil)oksy]metanoiminohydrazyd
[nie [(hydrazynokarboksyimidoil)oksy]formohydrazonoamid]

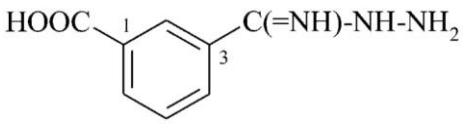
P-66.4.2.3 Przedrostki wyrażające amidrazony

P-66.4.2.3.1 Nazwy przedrostków dla grupy –C(=NH)-NHNH$_2$ to: ‘hydrazynokarboksyimidoil’ (preferowany przedrostek) pochodzący od kwasu hydrazynokarboksyimidowego, oraz ‘karbonohydrazydoimidoil’ utworzony z nazwy kwasu karbonohydrazydoimidowego. Jeżeli grupa ta jest zlokalizowana na końcu łańcucha węglowego, to w preferowanych nazwach IUPAC stosuje się przedrostki ‘imino’ i ‘hydrazynyl’, aby uniknąć fragmentacji łańcucha macierzystego.

Przykłady:



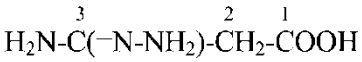
kwas 3-hydrazynylo-3-iminopropanowy (PIN)
kwas (hydrazynokarboksyimidoilo)octowy
kwas karbonohydrazydoimidoilooctowy



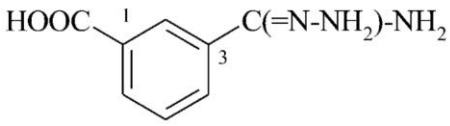
kwas 3-(hydrazynokarboksyimidoilo)benzoesowy (PIN)
kwas 3-karbonohydrazydoimidoilobenzoesowy
kwas 3-[hydrazynylo(imino)metylo]benzoesowy

P-66.4.2.3.2 Preferowanym przedrostkiem dla grupy –C(=N-NH$_2$)-NH$_2$ jest ‘karbamohydrazonoil’. W przypadku, gdy grupa ta jest zlokalizowana na końcu łańcucha węglowego, wówczas w preferowanych nazwach IUPAC stosuje się przedrostki ‘amino’ i ‘hydrazynylideno’, aby uniknąć fragmentacji łańcucha macierzystego.

Przykłady:



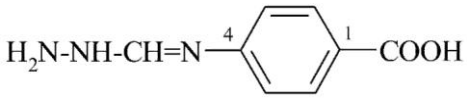
kwas 3-amino-3-hydrazynylidenopropanowy (PIN)
kwas karbamohydrazonoilooctowy



kwas 3-karbamohydrazonoilobenzoesowy (PIN)
kwas 3-[amino(hydrazynylideno)metylo]benzoesowy

P-66.4.2.3.3 Dla grupy –NH-CH=N-NH$_2$ stosuje się przedrostki: ‘metanohydrazonoamido’ (preferowany przedrostek) i ‘(hydrazynylidenometylo)amino’ oraz ‘metanohydrazonoiloamino’. Preferowanym przedrostkiem dla grupy –N=CH-NH-NH$_2$ jest ‘(hydrazynylometylideno)amino’.

Przykłady:



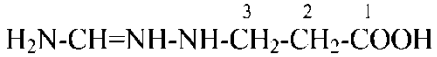
kwas -4-[(hydrazynylometylideno)amino]benzoesowy (PIN)

H_2N-N=CH-NH-CH_2-CH_2-CN

N-(2-cyjanoetylo)metanohydrazonoamidopropanonitryl (PIN)
(nie 3-[(methanohydrazonoil)amino]propanonitryl;
ani 3-[(hydrazynylidenometylo)amino]propanonitryl)

P-66.4.2.3.4 Grupę H_2N-CH=N-NH- nazywa się za pomocą przedrostka preferowanego '(aminometylideno)hydrazynylo'. Nazwy przedrostków dla grupy HN=CH-NH-NH- to: 'metanoimidohydrazydo' (preferowany przedrostek), '2-metanoimidoilohydrazyn-1-ylo' oraz '2-(iminometylo)hydrazyn-1-ylo'. Nazwy przedrostków dla grupy HC(=NNH_2)-NH- są następujące: 'metanohydrazonoamido' (preferowany przedrostek) i 'metanohydrazonoiloamino'.

Przykład:



kwas 3-[2-(aminometylideno)hydrazyn-1ylo]propanowy (PIN)

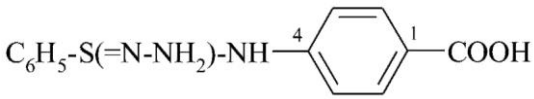
P-66.4.2.3.5 Jeśli obecna jest grupa, która ma pierwszeństwo w wymienianiu jako główna grupa charakterystyczna, to grupy R-C(=N-NH_2)-NH-, R-S(O)(=NH-NH_2)-NH- oraz ich selenowe i tellurowe analogów, nazywa się według dwóch metod:

(1) podstawnikowo, stosując przedrostek utworzony przez dodanie litery 'o' na końcu pełnej nazwy amidu;
(2) podstawnikowo, stosując przedrostek 'acyloamino', utworzony przez wstawienie nazwy grupy acylowej do podstawnika 'amino'.

Utworzone zgodnie z metodą (1) przedrostki są preferowane.

Przykład:

kwas 3-(etanohydrazonoamido)propanowy (PIN)
kwas 3-[(etanohydrazonoilo)amino]propanowy



kwas 4-(benzenosulfinohydrazonoamido)benzoesowy (PIN)
kwas 4-[(benzenosulfinohydrazonoilo)amino]benzoesowy

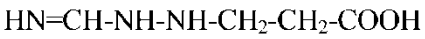
P-66.4.2.3.6 Jeśli obecna jest grupa, która ma pierwszeństwo do wymieniania jako główna grupa charakterystyczna, to nazwę hydrazydowej grupy typu R-C(=NH)-NHNH- lub R-S(=$NH)_2$-NHNH (oraz sellenowych i tellurowych analogów) tworzy się w następujący sposób:

(1) wymieniając odpowiedni hydrazyd jako przedrostek, utworzony przez dodanie litery 'o' na końcu nazwy hydrazydu;

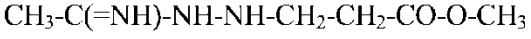
(2) stosując przedrostek 'acylohydrazynylo'; do numeracji grupy hydrazynylowej stosuje się lokanty liczbowe 1 i 2.

Przedrostek utworzony zgodnie z metodą (1) jest preferowany.

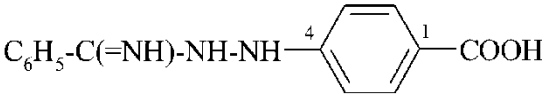
Przykłady:



kwas 3-(metanoimidohydrazydo)propanowy (PIN)
kwas 3-[2-(metanoimidoilo)hydrazyn-1-ylo]propanowy



(etanoimidohydrazydo)octan metylu (PIN)
[2-(etanoimidoilo)hydrazyn-1-ylo]octan metylu



(1) kwas 4-(benzenokarboksyimidohydrazydo)benzoesowy (PIN)
(2) kwas 4-[2-(benzenokarboksyimidoilo)hydrazyn-1-ylo]benzoesowy

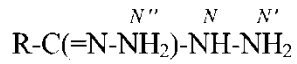
P-66.4.3 Hydrazydyny

P-66.4.3.1 Przyrostki wyrażające hydrazydyny

Związki o ogólnym wzorze R-C(=N-NH_2)-NH-NH_2 mają nazwę klasową‘hydrazydyny’ i nazywa się je podstawnikowo z użyciem przyrostków ‘hydrazonohydrazyd’ oraz ‘karbohydrazonohydrazyd’w sposób analogiczny jaki opisano dla hydrazydów. Nie zaleca się już poprzednio stosowanej metody nazywania hydrazydyn jako hydrazonów odpowiednich hydrazydów (patrz C-954.1 w ref. 1).

Hydrazydyny nazywa się zgodnie z zaleceniami, stosując nomenklaturę systematyczną, a nie jako hydrazony odpowiednich hydrazydów w myśl zaleceń z 1979 r.

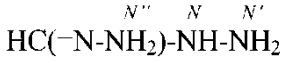
Lokanty przypisuje się atomom azotów w następujący sposób:



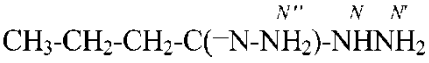
W razie konieczności, lokanty wskazujące pozycję charakterystycznej grupy hydrazydynowej w macierzystej strukturze podaje się jako cyfry arabskie w indeksie górnym odpowiedniego lokantu ‘*N*’.

Nazwy hydrazydyn, formalnie pochodnych kwasów karboksylowych o zachowanych nazwach, utworzone przez zastąpienie końcówki ‘ohydrazyd’ w nazwach hydrazydów końcówką ‘hydrazonohydrazyd’ mogą być używane w ogólnej nomenklaturze. Preferowane nazwy IUPAC tworzy się systematycznie. W innych przypadkach, nomenklaturę hydrazydów można zaadaptować do nazywania hydrazydyn, a zatem preferowana nazwa hydrazydyny wywodzi się od preferowanej nazwy hydrazydu. Nazwy niepodstawialnych pochodnych hydrazydów adaptowane są do niepodstawialnych pochodnych hydrazydyn.

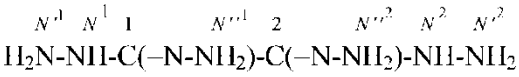
Przykłady:



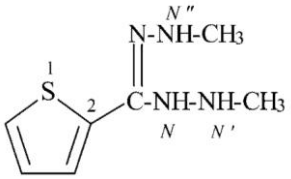
metanohydrazonohydrazyd (PIN)



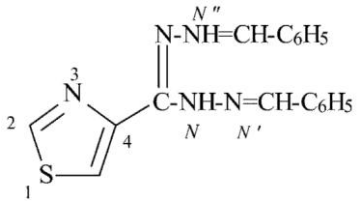
butanohydrazonohydrazyd (PIN)



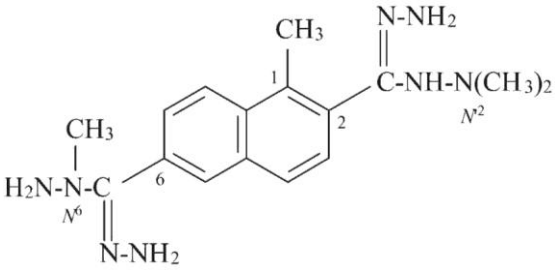
etanodihydrazonohydrazyd (PIN)



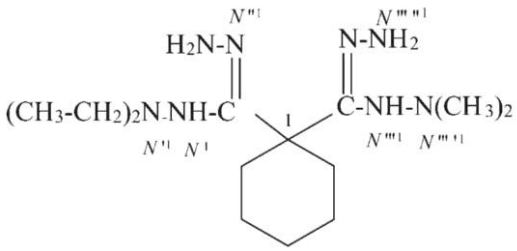
N′,*N″*-dimetylotiofeno-2-karbohydrazonohydrazyd (PIN)



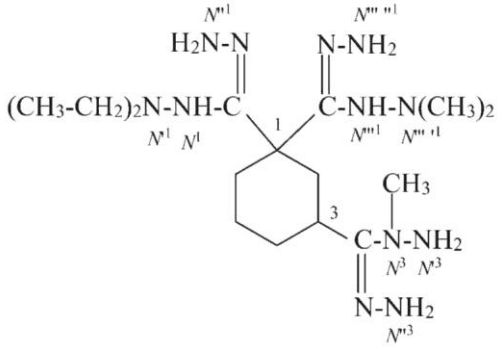
N′,*N″*-dibenzylideno-1,3-tiazolo-4-karbohydrazonohydrazyd (PIN)



N'^{2},N'^{2},N^{6},1-tetrametylonaftaleno-2,6-dikarbohydrazonohydrazyd (PIN).



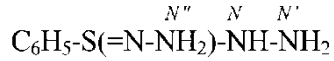
N'^{1},N'^{1} -dietylo- N''''^{1},N''''^{1} –dimetylocykloheksano-1,1-dikarbohydrazonohydrazyd (PIN)



N′¹,*N*¹ -dietylo- *N*‴ ′¹,*N*‴ ′¹,*N*³ –trimetylocykloheksano-1,1,3-trikarbohydrazonohydrazyd (PIN) (o lokantach *N, N*′ połączonych z liczbowymi lokantami, patrz P-16.9, P-62.4.1.2, P-66.4.4, P-66-3.1.2, P-66.3.3, P-66.4.1.1 i P-66.4.2.1).

P-66.4.3.2 Hydrazydyny pochodzące od kwasów sulfonowych i ich analogów selenowych i tellurowych, nazywa się zgodnie z tymi samymi zasadami.

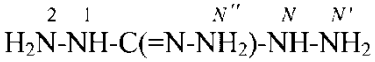
Przykład:



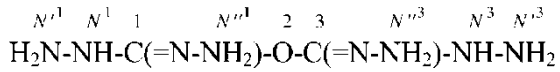
benzenosulfinohydrazonohydrazyd (PIN)

P-66.4.3.3 Hydrazydyny pochodne kwasu karbonowego i kwasów di- i polikarbonowych, nazywa się zgodnie z zasadami opisanymi dla odpowiednich hydrazydów (patrz P-66.3.5).

Przykład:



hydrazynokarbohydrazonohydrazyd (PIN)
dihydrazyd karbonohydrazonowy (P-65.2.1.5)

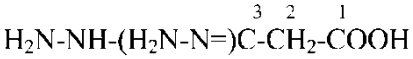


dihydrazyd dikarbonohydrazonowy (PIN, P-65.2.1.5)
(nie dihydrazyd dihydrazonodikarbonowy)

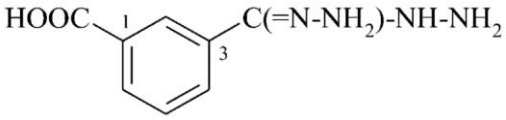
P-66.4.3.4 Przedrostki wyrażające hydrazydyny

P-66.4.3.4.1 Jeśli obecna jest mająca starszeństwo grupa charakterystyczna, przedrostkami dla grupy –C(=N-NH_2)-NH-NH_2 są ‘hydrazynokarbohydrazonoil’ (preferowany przedrostek) lub ‘*C*-hydrazynylokarbonohydrazonoil’. Jeśli grupa ta znajduje się na końcu łańcucha węglowego, to dla uniknięcia fragmentacji łańcucha preferuje się stosowanie przedrostków: ‘hydrazynyl’ i ‘hydrazynylideno’.

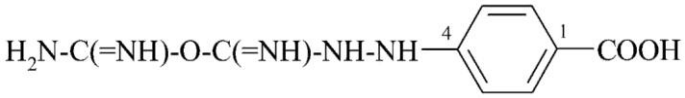
Przykłady:



kwas 3-hydrazynylo-3-hydrazynylidenopropanowy (PIN)
kwas (hydrazynokarbohydrazonoilo)octowy
kwas (*C*-hydrazynylokarbonohydrazonoilo)]octowy



kwas 3-(hydrazynokarbohydrazonoilo)benzoesowy (PIN)
kwas 3-(*C*-hydrazynylokarbonohydrazonoilo)]benzoesowy
kwas 3-[hydrazynylo(hydrazynylideno)metylo]benzoesowy



kwas 4-[*C*-(karbamoimidoiloksy)metanoimidohydrazydo]benzoesowy (PIN)
kwas 4-{2-[*C*-(karbamoimidoiloksy)metanoimidoilo]hydrazy-1-ylo}benzoesowy

P-66.4.3.4.2 W obecności starszej grupy charakterystycznej nazwami przedrostków grupy –NH-NH-CH=N-NH_2 są ‘2-(hydrazynylidenometylo)hydrazyn-1-ylo’ lub ‘metanohydrazono-hydrazydo’ (preferowany przedrostek); natomiast nazwą grupy –NH-N=CH-NH-NH_2 jest ‘(hydrazynylometylideno)hydrazynylo’ (preferowany przedrostek).

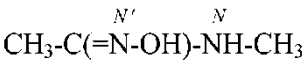
Przykład:

kwas [(hydrazynylometylideno)hydrazynylo]octowy (PIN)

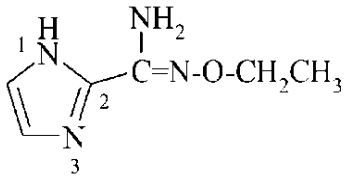
P-66.4.4 Amidooksymy (oksymy amidów)

Oksymy amidów są formalnie oksymami karboksyamidów, to jest związkami o wzorze ogólnym R-C(=N-OH)-NH_2 i ich podstawionymi pochodnymi. Preferowanymi nazwami IUAPC są *N′*-hydroksy lub *N′*-(alkoksy) pochodne karboksyimidoamidów (amidyn). Nie zaleca się już stosowania nazw takich jak ‘oksym amidu’ lub ‘oksym karboksyamidu’.

Przykład:



N′-hydroksy-*N*-metyloetanoimidoamid (PIN)
N′-hydroksy-*N*-metyloacetimidoamid
(nie oksym *N*-metyloacetamidu)



N'-etoksy-1*H*-imidazolo-2-karboksyimidoamid (PIN)
(nie *O*-etylooksym imidazolo-2-karboksyamidu)

P-66.5 NITRYLE

P-66.5.0 Wprowadzenie
P-66.5.1 Tworzenie preferowanych nazw nitryli
P-66.5.2 Podstawione nitryle
P-66.5.3 Nitryle/cyjanki wywodzące się z kwasów: karbonowego, di- i polikarbonowych
P-66.5.4 Oksydy (tlenki) nitryli oraz analogi chalkogenowe

P-66.5.0 Wprowadzenie

Związki o ogólnym wzorze R-C≡N nazywa się ‘nitrylami’ lub ‘cyjankami’. Nitryle i cyjanki pochodzą od kwasu cyjanowodorowego HC≡N. Gdy miejsce przyłączenia grupy -C≡N do grupy ‘R’ stanowi atom węgla lub heteroatom, to związki te należą do klasy nitryli i nazywa się je podstawnikowo. Mogą one również być nazwane cyjankami zgodnie z zasadami nomenklatury klasowo-funkcyjnej. W nomenklaturze podstawnikowej formonitryl i jego podstawione analogi są preferowanymi nazwami IUPAC. Zaś dla niepodstawionego analogu preferowaną nazwą IUPAC jest cyjanowodór.

Te dwa typy nomenklatury są w pełni omówione w niniejszym rozdziale.

P-66.5.1 Tworzenie preferowanych nazw nitryli

Związki o ogólnym wzorze R-C≡N mają nazwę klasową ‘nitryle’ i nazywa się je na trzy sposoby:

(1) podstawnikowo, stosując przyrostek ‘-nitryl’ dla –(C)N oraz ‘-karbonitryl’ dla –CN;

(2) przez zamianę końcówki ‘-owy’ w zachowanej nazwie kwasu karboksylowego na końcówkę ‘onitryl’ i pominięciem słowa ‘kwas’; , tak więc nomenklaturowe kryteria dla kwasów karboksylowych (patrz P-65.1.1.1) przeniesione są na nitryle, a nazwy niepodstawialnych kwasów karboksylowych adaptowane są do nazw niepodstawialnych nitryli (patrz P-65.1.1.2);

(3) stosując nomenklaturę klasowo-funkcyjną, wymienia się nazwę klasy ‘cyjanek’.

P-66.5.1.1 Nazwy podstawnikowe i klasowo-funkcyjne nitryli

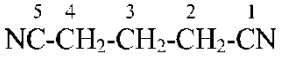
P-66.5.1.1.1 Acykliczne mono- i dinitryle nazywa się następującymi dwiema metodami:

(1) podstawnikowo, używając przyrostka ‘nitryl’;
(2) za pomocą nomenklatury klasowo-funkcyjnej, wymieniając nazwę klasy ‘cyjanek’

Metoda (1) dostarcza preferowanych nazw IUPAC.

Przykłady:

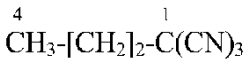
heksanonitryl (PIN)
cyjanek pentylu



pentanodinitryl (PIN)
dicyjanek propano-1,3-diylu

P-66.5.1.1.2 Jeśli nierozgałęziony alkan jest połączony z więcej niż dwiema terminalnymi grupami cyjanowymi, to grupy cyjanowe wskazuje poprzedzony przedrostkiem zwielokrotniającym i lokantami, przyrostek ‘karbonitryl’, wymieniony po nazwie macierzystego wodorku.

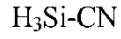
Przykład:



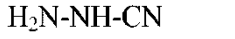
butano-1,1,1-trikarbonitryl (PIN)

P-66.5.1.1.3 Przyrostka ‘karbonitryl’ używa się zawsze w nazwach nitryli, w których grupa –CN połączona jest bezpośrednio z pierścieniem, układem pierścieni lub acyklicznym heteroatomem.

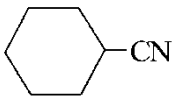
Pzrykłady:



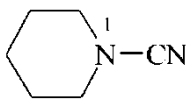
silanokarbonitryl (PIN)
cyjanek sililu



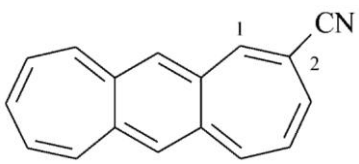
hydrazynokarbonitryl
cyjanohydrazyd (PIN, patrz, P-66.3.1.2.1)
cyjanek hydrazynylu (patrz P-66.5.1.3)



cykloheksanokarbonitryl (PIN)
cyjanek cykloheksylu



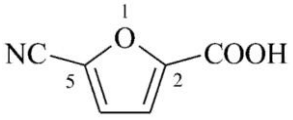
piperydyno-1-karbonitryl (PIN)



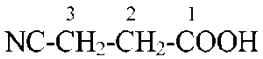
(benzo[1,2:4,5]di[7]annuleno)-2-karbonitryl (PIN)
(benzo[1,2:4,5]dicyklohepteno)-2-karbonitryl

P-66.5.1.1.4 Jeśli obecna jest grupa, mająca pierwszeństwo do wymieniania jako główna grupa charakterystyczn, lub gdy nie wszystkie grupy –CN mogą być wyrażone jako główna grupa charakterystyczna, grupę –CN wymienia się za pomocą preferowanego przedrostka ‘cyjano’. Przedrostek ‘cyjano’ **musi** być zastosowany także gdy grupa –CN jest położona na końcu łańcucha.

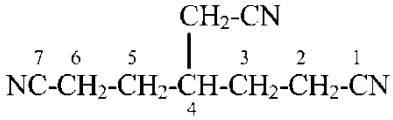
Przykłady:



kwas 5-cyjanofurano-2-karboksylowy (PIN)
kwas 5-cyjano-2-furoesowy



kwas 3-cyjanopropanowy (PIN)



4-(cyjanometylo)heptanodinitryl (PIN)

P-66.5.1.2 Nazwy nitryli wywodzące się z zachowanych nazw kwasów karboksylowych

P-66.5.1.2.1 Preferowane nazwy IUPAC dla nitryli, z nieograniczoną podstawialnością z wyjątkiem formonitrylu (metanonitrylu), dla którego zasady podstawienia są tożsame z regułami dla kwasu mrówkowego i oczywiście z wyjątkiem oksalonitrylu, który nie może być podstawiony, są następujące:

HCN

formonitryl (PIN)
metanonitryl
cyjanowodór

CH_3-CN

acetonitryl (PIN)
etanonitryl

C_6H_5-CN

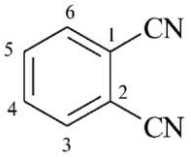
benzonitryl (PIN)

NC-CN

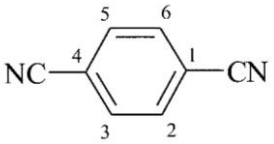
oksalonitryl (PIN)
etanodinitryl

P-66.5.1.2.2 W ogólnej nomenklaturze zachowane są tylko nazwy furonitryl, ftalonitryl, izoftalonitryl i tereftalonitryl z pełną możliwością podstawienia (patrz P-65.1.1.2.1). Preferowanymi nazwami IUPAC są nazwy systematyczne (patrz P-65.1.2).

Przykłady:



ftalonitryl
benzeno-1,2-dikarbonitryl (PIN)



tereftalonitryl
benzeno-1,4- dikarbonitryl (PIN)

P-66.5.1.2.3 Nazwy nitryli utworzone na bazie zachowanych nazw kwasów, omówionych w podrozdziale P-65.1.1.2.2 mogą być stosowane tylko w ogólnej nomenklaturze; podstawienie jest niedozwolone. Preferowanymi nazwami IUPAC są nazwy systematyczne (patrz P-66.5.1.1).

Przykłady:

CH_3-CH_2-CN

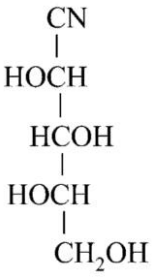
propionitryl
propanonitryl (PIN)

NC-CH_2-CH_2-CN

sukcynonitryl
butanodinitryl (PIN)

P-66.5.1.2.4 Nazwy nitryli utworzonych z węglowodanów i aminokwasów omówiono w podrozdziałach, odpowiednio, P-102.5.6.2.1 i P-103.2.7.

Przykłady:



L-ksylononitryl (patrz P-102.5.6.6.2.1)

H_2N-CH_2-CN

aminoacetonitryl (patrz P-103.2.7)
glicynonitryl

P-66.5.1.3 Nomenklatura klasowo-funkcyjna w tworzeniu preferowanych nazw IUPAC cyjanków

Nomenklaturę klasowo-funkcyjną stosuje się w tworzeniu nazw związków zgodnie ze starszeństwem klas, a także w nazwach takich związków, które nie mogą być nazwane podstawnikowo, np. w nazwach cyjanków wywodzących się z kwasów sulfonowych, sulfinowych i ich analogów selenowych i tellurowych, a także kwasu karbonowego, cyjanowego i innych kwasów nieorganicznych.

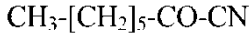
P-66.5.1.3.1 Nitryle z grupą α-okso

Związki o strukutrze R-CO-CN można nazywać jako cyjanki acyli podobnie do halogenków acyli. W porządku starszeństwa klas, cyjanki acyli są starsze od nitryli, dlatego stosowanie nomenklatury klasowo-funkcyjnej musi poprawnie wyrażać starszeńswo klas..

Przykłady:

cyjanek formylu (PIN)
oksoacetonitryl

cyjanek acetylu (PIN)
2-oksopropanonitryl



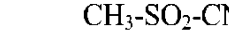
cyjanek heptanoilu (PIN)
2-oksooktanonitryl

dicyjanek oksalilu (PIN)
2,3-dioksobutanodinitryl

P-66.5.1.3.2 Cyjanki wywodzące się z kwasów siarkowego, selenowego i tellurowego

Cyjanki utworzone formalnie przez zastąpienie grupy –OH w kwasach sulfonowych, kwasach sulfinowych i podobnych kwasach Se i Te nazywa się nomenklaturą klasowo-funkcyjną.

Przykłady:



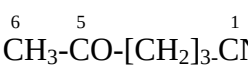
cyjanek metanosulfonylu (PIN)

cyjanek benzenoseleninylu (PIN)

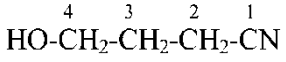
P-66.5.2 Podstawione nitryle

Podstawniki obecne przy macierzystych wodorkach są wymieniane jako przedrostki. Nitryle, zgodnie z porządkiem straszeństwa klas, są starsze niż ketony, pseudoketony, heterony, związki hydroksylowe i iminy; dlatego te klasy związków w obecności grupy nitrylowej muszą być podane w nazwie w formie przedrostków. Porządek numeracji nitryli polifunkcyjnych ustalany jest w taki sam sposób jaki opisano dla kwasów, patrz P-65.1.2.3 i P-65.3.4.

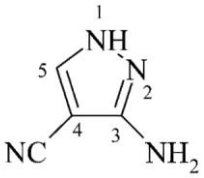
Przykłady:



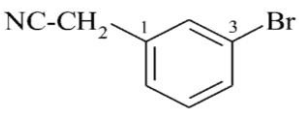
5-oksoheksanonitryl (PIN)



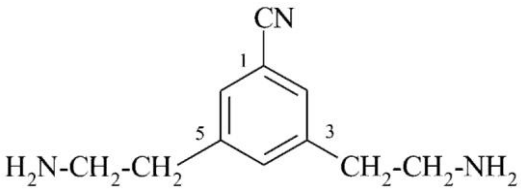
4-hydroksybutanonitryl (PIN)
(nie 4-hydroksybutyronitryl, nie ma podstawienia dla nazw zachowanych, patrz P-65.1.1.2)



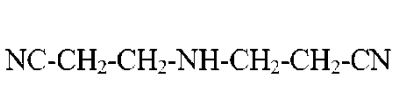
3-amino-1*H*-pirazolo-4-karbonitryl (PIN)



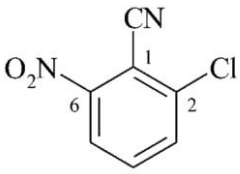
(3-bromofenylo)acetonitryl (PIN)



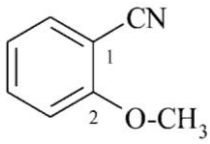
3,5-bis(2-aminoetylo)benzonitryl (PIN)



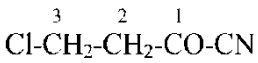
3,3′-azanodiylodipropanonitryl (PIN)
(nie 3,3'-azanodipropionitryl; nie ma podstawienia w nazwie propionitryl, patrz P-65.1.1.2)



2-chloro-6-nitrobenzonitryl (PIN)



2-metoksybenzonitryl (PIN)

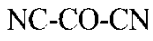


cyjanek 3-chloropropanoilu (PIN)
4-chloro-2-oksobutanonitryl
(nie cyjanek 3-chloropropionylu)

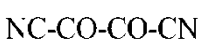
P-66.5.3 Nitryle/cyjanki wywodzące się z kwasów karbonowego i polikarbonowych

P-66.5.3.1 Nitryle wywodzące się z kwasów karbonowego, di- i polikarbonowych nazywa się zgodnie z nomenklaturą klasowo-funkcyjną:

Przykłady:



dicyjanek karbonylu (PIN)
2-oksopropanodinitryl



dicyjanek oksalilu (PIN)
2,3-dioksobutanodinitryl

(nie oksomalononitryl; podstawienie malononitrylu jest niedozwolone.

NC-C(=NH)-CN

dicyjanek karbonoimidoilu (PIN)
(nie 2-iminopropanodinitryl)

NC-C(=NNH$_2$)-CN

dicyjanek karbonohydrazonoilu (PIN)
(nie 2- hydrazonopropanodinitryl)

H$_2$N-CO-CN

cyjanek karbamoilu (PIN)

NC-CO-O-CO-CN

dicyjanek dikarbonoilu (PIN)
(patrz P-65.5.3.2)

P-66.5.4 Oksydy (tlenki) nitryli i analogi chalkogenowe

P-66.5.4.1 Związki o ogólnym wzorze R-C≡NO mają ogólną nazwę ‘oksydy (tlenki) nitryli’. Ponieważ mogą być traktowane jako zwitterjony (jony obojnacze), zalicza się je do zwitterjonów w porządku klas swiązków. Nazywa się je trzema metodami:

(1) stosując termin ‘oksyd’, ‘sulfid’ ‘selenid’ lub ‘telluryd’ dodany do nazwy nitrylu (patrz P-74.2.2.2.1.2);

(2) stosując λ-konwencję i podstawienie okso na atomie azotu (P-14.1);

(3) jako zwitterjony (patrz P-74.2.2.2.1.1).

Metoda (1) dostarcza preferowanych nazw IUPAC.

Przykłady:

C_6H_5-C$^-$N$^+$–O$^-$

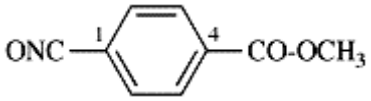
(1) oksyd benzonitrylu (PIN)
(2) benzylidyno(okso)-λ^5-azan
(3) (benzylidynoazaniumylo)oksydanid

HC≡ N$^+$O$^-$

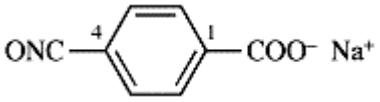
(1) oksyd formonitrylu (PIN)
(2) metylidyno(okso)-λ^5-azan
(3) (metylidynoazaniumylo)oksydanid

P-66.5.4.1 Jeśli istnieje konieczność określenia grupy -C≡NO w formie przedrostka, stosuje się metodę (2) opisaną powyżej.

Przykład:



oksyd 4-(metoksykarbonylo)benzonitrylu (PIN)
(nie 4-[(okso-λ^5-azanylidyno)metylo]benzoesan metylu)
(nie 4-izofulminianobenzoesan metylu)



sodium 4-[(okso-λ^5-azanylidyno)metylo]benzoesan sodu (PIN)
(już nie 4-izofulminianobenzoesan sodu)

P-66.6 ALDEHYDY

P-66.6.0 Definicja
P-66.6.1 Nazwy systematyczne aldehydów
P-66.6.2 Aldehydy wywodzące się z kwasu szczawiowego oraz kwasów polikarbonowych
P-66.6.3 Chalkogenowe analogi aldehydów
P-66.6.4 Aldehydy polifunkcyjne
P-66.6.5 Acetale i ketale, hemiacetale i hemiketale oraz ich analogi chalkogenowe

P-66.6.0 Wprowadzenie

Nazwa klasowa ‘aldehyd’ tradycyjnie odnosi się do związków zawierających grupę –CH=O połączoną z atomem węgla. Jednakże nomenklatura aldehydów stosuje się również do tworzenia nazw związków, w których grupa –CH=O połączona jest z heteroatomem.

P-66.6.1 Nazwy systematyczne aldehydów

Nazwy systematyczne aldehydów możemy tworzyć na trzy sposoby:

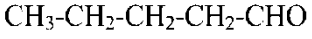
(1) podstawnikowo, stosując przyrostek ‘al’ dla –(C)HO oraz karboaldehyd dla –CHO;

(2) zastępując w zachowanych nazwach kwasów karboksylowych końcówki ‘owy’ na ‘aldehyd’ z pominięciem terminu ‘kwas’; reguły nomenklatury kwasów zostały zaadaptowane do aldehydów, stąd preferowane nazwy aldehydów wywodzą się z preferowanych nazw kwasów. Nazwy niepodstawialnych kwasów karboksylowych zaadaptowane są do niepodstawialnych aldehydów.

(3) stosując przedrostek ‘okso’, oznaczający =O lub ‘formylo’, oznaczający podstawnik -CHO.

P-66.6.1.1 Nazwy oparte na przyrostkach

P-66.6.1.1.1 Mono- i dialdehydy pochodzące od alkanów nazywa się podstawnikowo, stosując przyrostek ‘al’ dodany do nazwy macierzystego wodorku.
Przykłady:

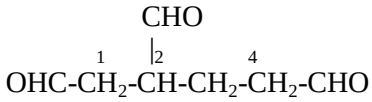


pentanal (PIN)

pentanodial (PIN)

P-66.6.1.1.2 Przyrostek ‘karboaldehyd’ stosuje się, gdy więcej niż dwie grupy –CHO są przyłączone do alkanu.

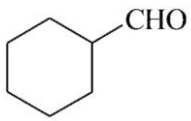
Przykład:



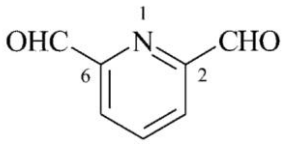
butano-1,2,4-trikarboaldehyd (PIN)

P-66.6.1.1.2 Przyrostek ‘karboaldehyd’ stosuje się, gdy grupa –CHO przyłączona jest do atomu węgla pierścienia, układu pierścieni albo do heteroatomu.

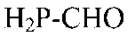
Przykłady:



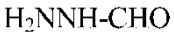
cykloheksanokarboaldehyd (PIN)



pirydyno-2,6-dikarboaldehyd (PIN)



fosfanokarboaldehyd (PIN)



hydrazynokarboaldehyd
formohydrazyd (PIN; hydrazyd jest starszy od aldehydu)

1,4,4-trimetylotetraaz-2-eno-1-karboaldehyd (PIN)

P-66.6.1.2 Nazwy aldehydów wywodzące się z zachowanych nazw kwasów karboksylowych

Nazwy aldehydów wywodzące się z nazw zachowanych kwasów karboksylowych tworzy się zastępując końcówkę '-owy' końcówką 'aldehyd', z pominieciem terminu 'kwas'. Nazwy podstawników w aldehydach tworzy się zgodnie z tymi samymi regułami jak w przypadku kwasów karboksylowych. (patrz P-65.1.1.2).

P-66.6.1.2.1 Poniższe nazwy są preferowanymi nazwami IUPAC. Podstawienie jest dozwolone dla acetaldehydu i benzaldehydu. Reguły podstawienia dla formaldehydu są takie same jak dla kwasu mrówkowego (patrz P-65.1.8).

HCHO

formaldehyd (PIN)
metanal

CH_3-CHO

acetaldehyd (PIN)
etanal

C_6H_5-CHO

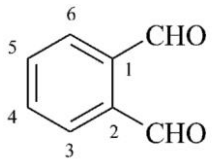
benzaldehyd (PIN)
benzenokarboaldehyd

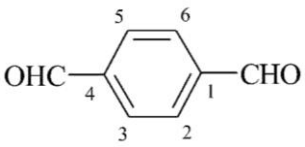
OHC-CHO

oksaloaldehyd (PIN)
etanodial
glioksal

P-66.6.1.2.2 W ogólnej nomenklaturze tylko nazwy furaldehyd, ftalaldehyd, isoftalaldehyd i tereftalaldehyd są zachowane z i dopuszcza się ich podstawienie (patrz P-34). Nazwy systematyczne (P-66.6.1.1) są preferowanymi nazwami IUPAC.

Przykłady:





ftaloaldehyd
benzeno-1,2-dikarboaldehyd (PIN)

tereftaloaldehyd
benzeno-1,4-dikarboaldehyd (PIN)

P-66.6.1.2.3 Nazwy aldehydów wywodzące się z zachowanych nazw kwasów karboksylowych podanych w P-65.1.1.2 są stosowane tylko w ogólnej nomenklaturze Podstawienie nie jest dozwolone. Nazwy systematyczne są preferowanymi nazwami IUPAC (patrz P-66.6.1.1).

Przykłady:

CH_3-CH_2-CHO

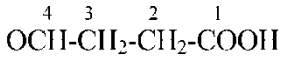
propionoaldehyd
propanal (PIN)

OHC-CH_2-CH_2-CHO

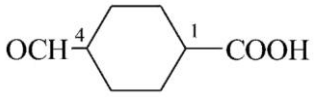
sukcynoaldehyd
butanodial (PIN

P-66.6.1.3 Jeśli obecna jest grupa charakterystyczna mająca pierwszeństwo przy wymienianiu w formie przyrostka lub gdy występuje w łańcuchu bocznym, to grupę –CHO zlokalizowaną na końcu łańcucha węglowego wyraża preferowany przedrostek ‘okso’, a w innych przypadkach wskazuje się preferowanym przedrostkiem ‘formylo’.

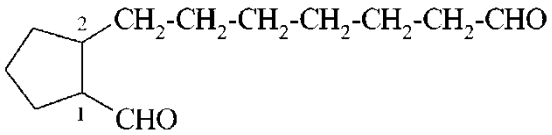
Przykłady:



kwas 4-oksobutanowy (PIN)
kwas 3-formylopropanowy



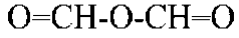
kwas 4-formylocykloheksano-1-karboksylowy (PIN)



2-(7-oksoheptylo)cyklopentano-1-karboaldehyd (PIN)
7-(2-formylocyklopentylo)-heptanoaldehyd (pierścień ma pierwszeństwo przed łańcuchem: patrz P-44.1.2.2)

P-66.6.2 Aldehydy wywodzące się z kwasów di- i polikarbonowych

Aldehydy wywodzące się z kwasów di- i polikarbonowych nazywa się na podstawie klasy związku mającej starszeństwo. Mogą być używane nazwy multiplikacyjne oparte na formaldehydzie (patrz P-15.3.2.1).
Przykłady:



anhydryd mrówkowy (PIN)
(w porządku starszeństwa klas bezwodnik jest przed aldehydem; patrz P-41)
oksydiformaldehyd

dianhydryd karbonowo- dimrówkowy PIN)
(w porządku starszeństwa klas bezwodnik jest przed estrem; patrz P-41)
karbonian bis(oksometylu)
[karbonylobis(oksy)]diformaldehyd

P-66.6.3 Chalkogenowe analogi aldehydów

Chalkogenowe analogi aldehydów nazywa się, stosując przyrostki i przedrostki przedstawione w Tabeli 6.4. Zgodnie z porządkiem starszeństwa klas, aldehydy są starsze od ketonów, związków hydroksylowych, amin i imin. Nazwy chalkogenowych analogów aldehydów mających nazwy zachowane tworzy się systematycznie.

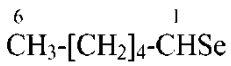
Tabela 6.4 Przyrostki i przedrostki nazw chalkogenowych analogów aldehydów

Grupa	Przyrostek	Przedrostek
-(C)HS	tial	sulfanyliden (preferowany przedrostek) tiokso
-(C)HSe	selenal	selanyliden (preferowany przedrostek) selenokso
-(C)HTe	tellanal	tellanyliden (preferowany przedrostek) tellurokso
-CHS	karbotioaldehyd	metanotioil (preferowany przedrostek) tioformyl
-CHSe	karboselenoaldehyd	metanoselenoil (preferowany przedrostek) selenoformyl
-CHTe	karbotelluroaldehyd	metanotelluroil (preferowany przedrostek) telluroformyl

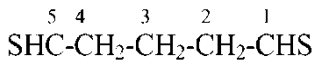
Przykłady:

etanotial (PIN)
tioacetaldehyd

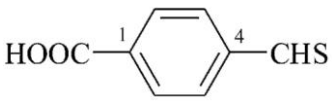
benzenokarbotioaldehyd (PIN)
tiobenzaldehyd



heksanoselenal (PIN)

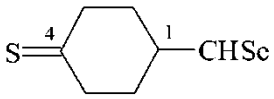


pentanoditial (PIN)



kwas 4-(metanotioilo)benzoesowy (PIN)
kwas 4-(tioformylo)benzoesowy

kwas 4-(metanoselenoilo)cykloheksano-1-karboksylowy (PIN)
kwas 4-(selenoformylo)cykloheksano-1-karboksylowy

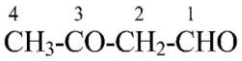


4-sulfanylidenocykloheksano-1- karboselenoaldehyd (PIN)
4-tioksocykloheksano-1-karboselenoaldehyd

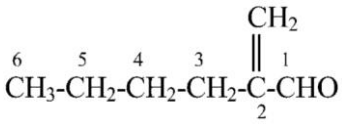
P-66.6.4 Aldehydy polifunkcyjne

W obecności grupy aldehydowej ketony, pseudoketony, heterony, związki hydroksylowe, aminy i iminy, wyraża się w formie przedrostka. Kolejność numeracji w strukturach aldehydów polifunkcyjnych ustala się zgodnie z regułami obowiązującymi dla kwasów (patrz P-65.1.2.3 i P-65.3.4).

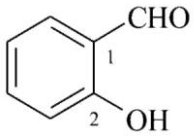
Przykłady:



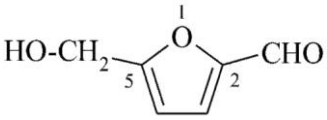
3-oksobutanal (PIN)
3-oksobutyroaldehyd



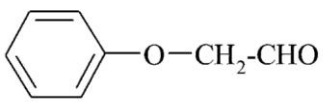
2-metylidenoheksanal (PIN)
[nie 2-butyloprop-2-enal, wybór najdłuższego łańcucha, patrz P-44.3)]



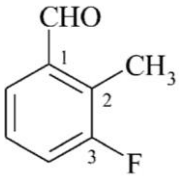
2-hydroksybenzaldehyd (PIN)
(nie salicyloaldehyd)



5-(hydroksymetylo)furano-2-karboaldehyd (PIN)
[nie 5-(hydroksymetylo)furfural]



fenoksyacetaldehyd (PIN)



3-fluoro-2-metylobenzaldehyd (PIN)

P-66.6.5 Acetale i ketale, hemiacetale i hemiketale i ich analogi chalkogenowe

P-66.6.5.1 Acetale i ketale
P-66.6.5.2 Hemiacetale i hemiketale
P-66.6.5.3 Analogi chalkogenowe acetali i ketali

P-66.6.5.1 Acetale i ketale

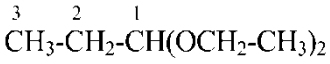
P-66.6.5.1 Związki o ogólnym wzorze RR'C(O-R")(O-R'"), gdzie tylko R i R' mogą być, ale nie muszą, atomami wodoru, należą do klasy związków zwanych „acetalami". Podklasą acetali są 'ketale', w których ani R ani R' nie mogą być atomami wodoru. Nazwy zarówno acetali jak i ketali tworzy się na dwa sposoby:

(1) podstawnikowo, jako 'alkoksy', 'alkiloksy', 'aryloksy' itp. pochodne odpowiednich macierzystych wodorków lub związków o macierzystych funkcjach;

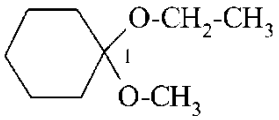
(2) stosując nomenklaturę klasowo-funkcyjną, wymieniając nazwę aldehydu lub ketonu (w formie dopełniacza) poprzedzoną nazwą klasy związku: 'acetal' lub 'ketal' oraz nazwą(ami) *O*-podstawnika(ów) w porządku alfanumerycznym (jeśli istnieje potrzeba ustalenia kolejności).

Preferowane nazwy IUPAC tworzy się zgodnie z metodą podstawnikową (1).

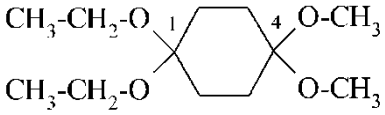
Przykłady:



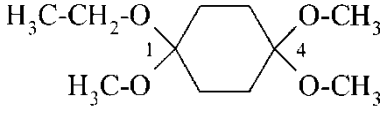
(1) 1,1-dietoksypropan (PIN)
(2) acetal dietylowy propanalu



(1) 1-etoksy-1-metoksycykloheksan (PIN)
(2) ketal etylowo-metylowy cykloheksanonu



(1)1,1-dietoksy-4,4-dimetoksycykloheksan (PIN)
(2) diketal 1,1-dietylowo-4,4-dimetylowy cykloheksano-1,4-dionu



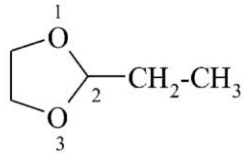
(1) 1-etoksy-1,4,4-trimetoksycykloheksan (PIN)
(2) diketal 1-etylowo-1,4,4-trimetylowy cykloheksano-1,4-dionu

P-66.6.5.1.2 Cykliczne acetale i ketale

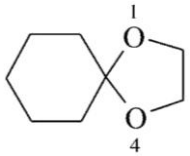
Cykliczne acetale jako główną funkcję nazywa się jako związki heterocykliczne i tak utworzone nazwy są preferowanymi nazwami IUPAC; cykliczne ketale są związkami spiro, które nazywa się zgodnie z regułami opisanymi w rozdziale P-24 prowadzącymi do preferowanych nazw IUPAC.

W ogólnej nomenklaturze dopuszcza się nazwy klasowo-funkcyjne, w których wymienia się odpowiedni diwalencyjny podstawnik.

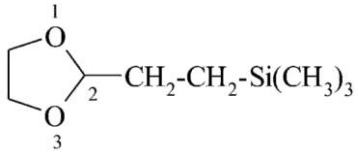
Przykłady:



2-etylo-1,3-dioksolan (PIN)
acetal etylenowy propanalu



1,4-dioksaspiro[4.5]dekan (PIN)
ketal etylenowy cykloheksanonu

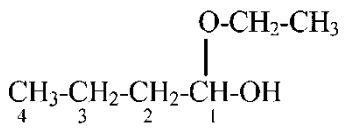


[2-(1,3-dioksolan-2-ylo)etylo]trimetylosilan (PIN)
ketal etylenowy 3-(trimetylosililo)propanalu

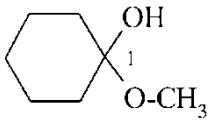
P-66.6.5.2 Hemiacetale i hemiketale

Związki o wzorze ogólnym RR'C(OH)(O-R"), mają nazwę klasową ‘hemiacetale’. Nazywa się je podstawnikowo jako ‘alkoksy’, ‘alkiloksy’, ‘aryloksy’ itp. pochodne odpowiedniego macierzystego związku hydroksylowego takiego jak alkohol; tak utworzone nazwy są preferowanymi nazwami IUPAC. Alternatywnie można je nazywać stosując nomeklaturę klasowo-funkcyjną, wówczas nazwę klasy ‘hemiacetal’ wymienia się na początku, podobnie pochodne ketonów określa się nazwą klasową ‘hemiketale’.

Przykłady:



1-etoksybutan-1-ol (PIN)
hemiacetal etylowy butanalu

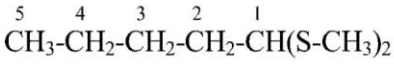


1-metoksycykloheksan-1-ol (PIN)
hemiketal metylowy cykloheksanonu

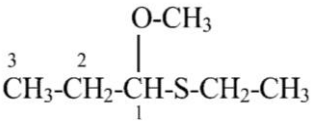
P-66.6.5.3 Chalkogenowe analogi acetali i ketali

Siarkowe analogi acetali i ketali o ogólnej strukturze RR′C(SR″)(SR‴) lub RR′C(SR″)(OR‴) mają nazwę klasową, odpowiednio, ‘ditioacetale’ lub ‘monotioacetale’. W nomenklaturze podstawnikowej nazywa się je jako pochodne, odpowiednio, ‘alkilosulfanylo’, ‘arylosulfanylo’, ‘alkoksy’ lub ‘aryloksy’ macierzystego wodorku; są to preferowane nazwy IUPAC. Inne nazwy można tworzyć według nomenklatury klasowo- funkcyjnej z zastosowaniem nazw klasowych takich jak ‘monotioacetal’ i ‘ditioketal’. Lokanty pisane dużymi litrami kursywą używa się do sprecyzowania struktury. Analogi selenowe, tellurowe oraz mieszane są traktowane w ten sam sposób jak analogi siarkowe.

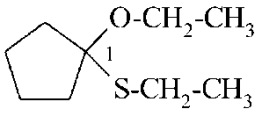
Przykłady:



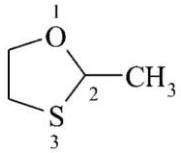
1,1-bis(metylosulfanylo)pentan (PIN)
ditioacetal dimetylowy pentanalu



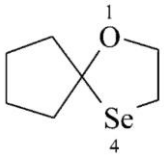
1-(etylosulfanylo)-1-metoksypropan (PIN)
monotioacetal *S*-etylowo-*O*-metylowy propanalu



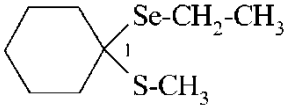
1-etoksy-1-(etylosulfanylo)cyklopentan (PIN)
monotioketal dietylowy cyklopentanonu



2-metylo-1,3-oksatiolan (PIN)
monotioketal etylenowy acetaldehydu



1-oksa-4-selenaspiro[4.4]nonan (PIN)
monoselenoketal etylenowy cyklopentanonu



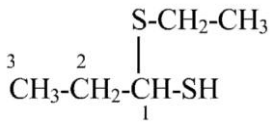
1-(etyloselanylo)-1-(metylosulfanylo)cykloheksan (PIN)
selenotioketal *Se*-etylowo-*S*-metylowy cykloheksanonu

P-66.6.5.4 Chalkogenowe analogi hemiacetali i hemiketali

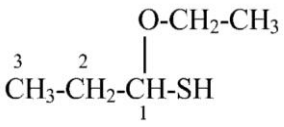
Siarkowe analogi hemiacetali i hemiketali o ogólnej strukturze RR′C(SH)(SR″) lub RR′C(OH)(SR″) mają klasową nazwę, odpowiednio, ‘ditiohemiacetale’ lub ‘monotiohemiacetale’. W nomenklaturze podstawnikowej nazywa się je jako pochodne, odpowiednio, ‘alkilosulfanylo’, ‘arylosulfanylo’, ‘alkoksy’ lub ‘aryloksy’ macierzystego związku hydroksylowego; są to preferowane

nazwy IUPAC. Inne nazwy można tworzyć według nomenklatury klasowo-funkcyjnej. Lokanty pisane dużymi literami kursywą używa się do sprecyzowania struktury. Analogi selenowe, tellurowe oraz mieszane są traktowane w ten sam sposób jak ich analogi siarkowe; ogólnie są to: „monoselenohemiacetale", „ditellurohemiacetale", selenotiohemiacetale, itp.

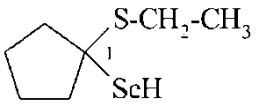
Przykłady:



1-(etylosulfanylo)propano-1-tiol (PIN)
ditiohemiacetal etylowy propanalu



1-etoksypropano-1-tiol (PIN)
monotiohemiacetal *O*-etylowy propanalu



1-(etylosulfanylo)cyklopentano-1-selenol PIN)
selenotiohemiketal *S*-etylowy cyklopentanonu

P-67 MONONUKLEARNE I POLINUKLEARNE NIEWĘGLOWE KWASY I ICH ANALOGI Z ZAMIANĄ FUNKCJI JAKO FUNKCYJNE ZWIĄZKI MACIERZYSTE DLA NAZYWANIA ZWIĄZKÓW ORGANICZNYCH

P-67.0 Wprowadzenie
P-67.1 Mononuklearne niewęglowe oksokwasy
P-67.2 Di- i polinuklearne niewęglowe oksokwasy
P-67. 3 Nazwy podstawnikowe

P-67.0 WPROWADZENIE

Mono-, di- i polinuklearne niewęglowe oksokwasy i ich analogi chalkogenowe mające zachowane nazwy traktuje się jako struktury macierzyste dla tworzenia nazw związków zawierających węgiel. W niniejszych zaleceniach nazwy tych związków są wstępnie wybranymi nazwami (patrz P-12.2).

Nazwy chalkogenowych analogów niewęglowych oksokwasów tworzy się za pomocą nomenklatury zamiennej funkcji. Ten typ nomenklatury jest stosowany również dla tworzenia klas pochodnych, np.: halogenków i pseudohalogenków kwasowych, amidów, hydrazydów i amidyn. Z punktu widzenia zamiany funkcji, mono-, dwu- i polinuklearne oksokwasy niewęglowe nie stanowią grupy jednorodnej. Nazwy kwasów mononuklearnych modyfikuje się za pomocą wrostków, z wyjątkiem kwasu krzemowego, azotawego, azotowego i kwasów halogenowych. Natomiast nazwy kwasów di- i polinuklearnych modyfikuje sie przedrostkami. Nomenklatura klasowo-funkcyjna używana jest do tworzenia nazw estrów, bezwodników organicznych, zawierających węgiel pseudohalogenków takich jak cyjanki, izocyjaniany oraz organicznych pochodnych amidów, imidów i hydrazydów.

Najpierw dyskutowane są mononuklearne oksokwasy niewęglowe, następnie di- i polinuklearne oksokwasy niewęglowe, takie jak kwas difosforowy, $(HO)_2P(O)\text{-}O\text{-}P(O)(OH)_2$, nazywane jako kwasy, a nie bezwodniki, i kwas hypodifosforowy $(HO)_2P(O)\text{-}P\text{-}(O)(OH)_2$.

Usystematyzowanie osiągnięto biorąc pod uwagę nomenklaturę związków nieorganicznych (odn. 12), która ograniczyła stosowanie nazw zachowanych oraz przedrostków takich jak „hypo", „orto", „izo" dodawanych do nazw mononuklearnych oksokwasów dla utworzenia nazw zachowanych. Utrzymano jednak tradycyjną nomenklaturę organicznych związków pochodnych oksokwasów mono-, di-, i polinuklearnych.

Kwasy karbonowe, cyjanowe di- i polinuklearne kwasy karbonowe opisane są w sekcji P-65.2.

P-67.1 MONONUKLEARNE OKSOKWASY NIEWĘGLOWE

Zachowane nazwy mononuklearnych oksokwasów niewęglowych dotyczą związków zawierających jako centralne atomy następujące pierwiastki: N, P, As, Sb, Si, B, S, Se, Te, F, Cl, Br i I. Używa się je jako struktury macierzyste, ale również do utworzenia przedrostków, które mają być zastosowane w obecności klas mających pierwszeństwo do wskazywania jako związki macierzyste. Te macierzyste struktury zachowały nazwy tradycyjne, stosowane jako nazwy wstępnie wybrane (patrz P-12.2). Mogą one mieć również systematyczne nazwy addycyjne lub podstawnikowe, ale nazwy te nie są zalecane do tworzenia nazw wstępnie wybranych (patrz IR-8, odn. 12).

Najpierw dyskutowana jest nomenklatura zamienna funkcji; następnie opisane jest tworzenie nazw estrów i bezwodników przy użyciu nomenklatury klasowo-funkcyjnej i na końcu nomenklatura podstawnikowa z użyciem przedrostków. W P-42 dyskutowane jest zastosowanie porządku starszeństwa oksokwasów i ich pochodnych. Podrozdział kończy się nomenklaturą związków *aci*-nitro, które nazywane są jako pochodne kwasu azynowego.

P-67.1.1 Nazwy mononuklearnych oksokwasów niewęglowych i ich pochodnych tworzone przez podstawienie
P-67.1.2 Nomenklatura zamienna funkcji stosowana do oksokwasów niewęglowych
P-67.1.3 Estry i bezwodniki oksokwasów niewęglowych
P-67.1.4 Podstawniki pochodzące z oksokwasów niewęglowych, wyrażane jako przedrostki
P-67.1.5 Porządek starszeństwa dla oksokwasów niewęglowych i ich pochodnych
P-67.1.6 Związki *aci*-nitro

P-67.1.1 Nazwy mononuklearnych oksokwasów niewęglowych i ich pochodnych tworzonych przez podstawienie

P-67.1.1.1 Nazwy mononuklearnych oksokwasów niewęglowych

Wstępnie wybrane nazwy (patrz P-12.2) mononuklearnych oksokwasów niewęglowych używane dla tworzenia preferowanych nazw IUPAC związków organicznych i nazw dla ogólnej nomenklatury organicznej są wymienione poniżej w porządku alfabetycznym.

$H_2As(O)(OH)$	kwas arsynowy (nazwa wstępnie wybrana)
H_2AsOH	kwas arsynawy (nazwa wstępnie wybrana)
$HAs(O)(OH)_2$	kwas arsonowy (nazwa wstępnie wybrana)

$HAs(OH)_2$	kwas arsonawy (nazwa wstępnie wybrana)
$As(O)(OH)_3$	kwas arsorowy (nazwa wstępnie wybrana) kwas arsenowy

Uwaga: Kwas arsorowy jest preferowany względem kwasu arsenowego jako nazwa wstępnie wybrana ze względu na klarowność i zgodność z kwasem fosforowym

$As(OH)_3$	kwas arsorawy (dawniej kwas arsenawy)

Uwaga: Kwas arsorawy jest preferowany względem kwasu arsenawego jako nazwa wstępnie wybrana ze względu na klarowność i zgodność z kwasem fosforawym

$H_2N(O)(OH)$	kwas azynowy (nazwa wstępnie wybrana)
$H_2N\text{-}OH$	kwas azynawy hydroksyloamina (nazwa wstępnie wybrana, patrz P-68.3.1.1.1)
$HN(O)(OH)_2$	kwas azonowy (nazwa wstępnie wybrana)
$HN(OH)_2$	kwas azonawy (nazwa wstępnie wybrana)
$N(O)(OH)_3$	kwas nitrorowy (nazwa wstępnie wybrana)[1]
$N(OH)_3$	kwas azorawy (nazwa wstępnie wybrana)
$B(OH)_3$	kwas borowy (nazwa wstępnie wybrana)
$H_2B(OH)$	kwas borynowy (nazwa wstępnie wybrana)
$HB(OH)_2$	kwas boronowy (nazwa wstępnie wybrana)
$Br(O)_2(OH)$	kwas bromowy (nazwa wstępnie wybrana)
$Br(O)(OH)$	kwas bromawy (nazwa wstępnie wybrana)
$Cl(O)_2(OH)$	kwas chlorowy (nazwa wstępnie wybrana)
$Cl(O)(OH)$	kwas chlorawy (nazwa wstępnie wybrana)
$Br(OH)$	kwas hypobromawy (nazwa wstępnie wybrana)
$Cl(OH)$	kwas hypochlorawy (nazwa wstępnie wybrana)
$F(OH)$	kwas hypofluorawy (nazwa wstępnie wybrana)
$I(OH)$	kwas hypojodawy (nazwa wstępnie wybrana)
$I(O)_2(OH)$	kwas jodowy (nazwa wstępnie wybrana)
$I(O)(OH)$	kwas jodawy (nazwa wstępnie wybrana)
$HO\text{-}NO_2$	kwas azotowy (nazwa wstępnie wybrana)
$HO\text{-}NO$	kwas azotawy (nazwa wstępnie wybrana)
$Br(O)_3(OH)$	kwas perbromowy (nazwa wstępnie wybrana)
$Cl(O)_3(OH)$	kwas perchlorowy (nazwa wstępnie wybrana)
$F(O)_3(OH)$	kwas perfluorowy (nazwa wstępnie wybrana)
$I(O)_3(OH)$	kwas perjodowy (nazwa wstępnie wybrana)
$H_2P(O)(OH)$	kwas fosfinowy (nazwa wstępnie wybrana)
$H_2P(OH)$	kwas fosfinawy (nazwa wstępnie wybrana)
$HP(O)(OH)_2$	kwas fosfonowy (nazwa wstępnie wybrana)

[1] Na stronie 935 ten sam związek nosi nazwę kwas nitrorowy

$HP(OH)_2$	kwas fosfonawy (nazwa wstępnie wybrana)
$P(O)(OH)_3$	kwas fosforowy (nazwa wstępnie wybrana)
$P(OH)_3$	kwas fosforawy (nazwa wstępnie wybrana)
$Se(O)_2(OH)_2$	kwas selenowy (nazwa wstępnie wybrana)
$Se(O)(OH)_2$	kwas selenawy (nazwa wstępnie wybrana)
$Si(OH)_4$	kwas krzemowy (nazwa wstępnie wybrana) (nie kwas ortokrzemowy)
$H_2Sb(O)(OH)$	kwas stybinowy (nazwa wstępnie wybrana)
$H_2Sb(OH)$	kwas stybinawy (nazwa wstępnie wybrana)
$HSb(O)(OH)_2$	kwas stybonowy (nazwa wstępnie wybrana)
$HSb(OH)_2$	kwas stybonawy (nazwa wstępnie wybrana)
$Sb(O)(OH)_3$	kwas styborowy (nazwa wstępnie wybrana)
$Sb(OH)_3$	kwas styborawy (nazwa wstępnie wybrana)
$S(O)_2(OH)_2$	kwas sulfurowy (nazwa wstępnie wybrana)
$S(O)(OH)_2$	kwas sulfurawy (nazwa wstępnie wybrana)
$Te(O)_2(OH)_2$	kwas tellurowy (nazwa wstępnie wybrana)
$Te(O)(OH)_2$	kwas tellurawy (nazwa wstępnie wybrana)

Wprowadzone nazwy kwas sulfurowy i kwas sulfurawy oraz tworzone z nich przedrostki, wrostki przyrostki mają służyć tworzenia nazw związków organicznych. Nie oznacza to odejścia od nazw kwas siarkowy i kwas siarkawy w chemicznej nomenklaturze.

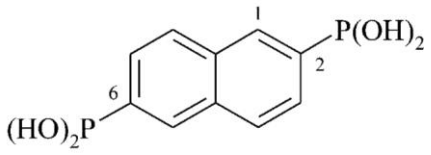
P-67.1.1.2 Podstawienie mononuklearnych oksokwasów niewęglowych z atomami wodoru przyłączonymi do atomu centralnego (podstawialny atom wodoru)

Kwasy z atomami wodoru przyłączonymi do atomu centralnego mogą być podstawiane przez grupy organiczne, a preferowane nazwy IUPAC są tworzone w ten sposób.

> **Uwaga: S**ugerowano inną metodę, która traktowałaby nazwę kwasu jako przyrostek (jak kwas sulfonowy), prowadząc do nazw takich jak kwas benzenofosfonowy. Sugestia ta została odrzucona, ponieważ w przypadku kwasu mającego dwa podstawialne atomy wodoru wymagane byłoby stosowanie dodatkowych lokantów literowych prowadzące do niepotrzebnie bardziej skomplikowanych nazw.

Przykłady:

C_2H_5-$P(O)(OH)_2$	kwas etylofosfonowy (PIN) (nie kwas etanofosfonowy)
$(C_2H_5)_2P(O)(OH)$	kwas dietylofosfinowy (PIN) (nie kwas *P*-etyloetanofosfinowy)
$(C_6H_5)_2As(OH)$	kwas difenyloarsynawy (PIN)
$C_6H_5Sb(OH)_2$	kwas fenylostybonawy (PIN)



kwas (naftaleno-2,6-diylo)bis(fosfonawy) (PIN)

P-67.1.2 Nomenklatura zamienna funkcji stosowana do oksokwasów nie węglowych

Mononuklearne niewęglowe oksokwasy modyfikuje się wrostkami lub przedrostkami w nomenklaturze zamiennej funkcji

P-67.1.2.1 Kwasy mononuklearne modyfikowane infiksami
P-67.1.2.2 Kwasy mononuklearne modyfikowane przedrostkami
P-67.1.2.3 Ogólna metodologia nomenklatury zamiennej funkcji
P-67.1.2.4 Kwasy modyfikowane w nomenklaturze zamiennej funkcji
P-67.1.2.5 Halogenki i pseudohalogenki kwasowe
P-67.1.2.6 Amidy i hydrazydy

P-67.1.2.1 Mononuklearne oksokwasy niewęglowe modyfikuje się wrostkami. Następujące kwasy modyfikowane za pomocą wrostków; zgrupowane są w porządku: B, N, P, As, Sb, S, Se, Te

$B(OH)_3$	kwas borowy
$HB(OH)_2$	kwas boronowy
$H_2B(OH)$	kwas borynowy
$N(O)(OH)_3$	kwas azorowy (hipotetyczny)
$N(OH)_3$	kwas azorawy (hipotetyczny)
$HN(O)(OH)_2$	kwas azonowy
$H_2N(O)(OH)$	kwas azynowy
$HN(OH)_2$	kwas azonawy
$P(O)(OH)_3$	kwas fosforowy
$P(OH)_3$	kwas fosforawy
$HP(O)(OH)_2$	kwas fosfonowy
$HP(OH)_2$	kwas fosfonawy
$H_2P(O)(OH)$	kwas fosfinowy
$H_2P(OH)$	kwas fosfinawy
$As(O)(OH)_3$	kwas arsorowy (dawniej kwas arsenowy)
$As(OH)_3$	kwas arsorawy (dawniej kwas arsenawy)
$HAs(O)(OH)_2$	kwas arsonowy
$HAs(OH)_2$	kwas arsonawy
$H_2As(O)(OH)$	kwas arsynowy
$H_2AsOH)$	kwas arsynawy
$Sb(O)(OH)_3$	kwas styborowy (dawniej kwas antymonowy)
$Sb(OH)_3$	kwas styborawy (dawniej kwas antymonawy)
$HSb(O)(OH)_2$	kwas stybonowy
$HSb(O)(OH)_2$	kwas stybonawy

$H_2Sb(O)(OH)$	kwas stybinowy
$H_2Sb(OH)$	kwas stybinawy
$S(O)_2(OH)_2$	kwas siarkowy (kwas sulfurowy, patrz str.858)
$S(O)(OH)_2$	kwas siarkawy (kwas sulfurawy, patrz str.858)
$Se(O)_2(OH)_2$	kwas selenowy
$Se(O)(OH)_2$	kwas selenawy
$Te(O)_2(OH)_2$	kwas tellurowy
$Te(O)(OH)_2$	kwas tellurawy

P-67.1.2.2 Mononuklearne niewęglowe oksokwasy modyfikowane przedrostkami wymienione w kolejności: Si, N, F, Cl, Br, I.

$Si(OH)_4$	kwas krzemowy (dawniej kwas ortokrzemowy)
$HO\text{-}NO_2$	kwas azotowy
HO-NO	kwas azotawy
$F(O)_3(OH)$	kwas perfluorowy
$F(O)_2(OH)$	kwas fluorowy
F(O)(OH)	kwas fluorawy
F(OH)	kwas hypofluorawy
$Cl(O)_3(OH)$	kwas perchlorowy
$Cl(O)_2(OH)$	kwas chlorowy
Cl(O)(OH)	kwas chlorawy
Cl(OH)	kwas hypochlorawy
$Br(O)_3(OH)$	kwas perbromowy
$Br(O)_2(OH)$	kwas bromowy
Br(O)(OH)	kwas bromawy
Br(OH)	kwas hypobromawy
$I(O)_3(OH)$	kwas perjodowy
$I(O)_2(OH)$	kwas jodowy
I(O)(OH)	kwas jodawy
I(OH)	kwas hypojodawy

P-67.1.2.3 Ogólna metodologia nomenklatury zamiennej funkcji z użyciem wrostków

Nomenklatura zamienna funkcji (patrz P-15.5) z użyciem wrostków tworzy nazwy klasowo-funkcyjne dla następujących klas: halogenki kwasowe, pseudohalogenki kwasowe (azydki, cyjanki, izocyjanki i izocyjaniany), amidy, hydrazydy jak również kwasy imidowe, hydrazonowe i nitrydowe. Analogi chalkogenowe również opisywane są wrostkami.

> **Uwaga:** Preferowane nazwy IUPAC są zachowanymi nazwami modyfikowanymi nomenklaturą zamienną funkcji. Zastosowanie wrostków ograniczone jest do kwasów wymienionych w P-67.1.2.1 i prowadzi do nazw preferowanych nazw IUPAC. Przedrostki używane są zgodnie z zaleceniem dla kwasów wymienionym w P-67.1.2.2 i w ogólnej nomenklaturze dla wszystkich kwasów mononuklearnych. Nazwy podstawnikowe i nazwy

modyfikowane przedrostkamii stosuje się tylko w wyjątkowych przypadkach (patrz P-67.1.4.1.1.6 i P-67.3.1).

Przykład:

$(C_6H_5)_2P$-SH kwas difenylofosfinotiawy (PIN)
(nie difenylofosfanotiol)
(nie difenylo(sulfanylo)fosfan)

P-67.1.2.3.1 Następujące wrostki stosuje się do opisania zastępstwa =O i –OH analogami chalkogenowymi (w malejącym porządku starszeństwa):

(1) –OO-	perokso
(2) –OS- lub –SO-	tioperokso (podobnie selenoperokso, telluroperokso
(3) –SS-	ditioperokso (diselenoperokso, ditelluroperokso)
(4) –SSe- lub –SeS-	selenotioperokso (podobnie dla innych mieszanych chalkogenów
(5) –S- lub =S	tio
(6) –Se- lub =Se	seleno
(7) –Te- lub =Te	telluro

P-67.1.2.3.2 Wrostki oznaczające klasy (w malejącym porządku starszeństwa oprócz halogenków, które mają tę samą rangę ale są wymienione w porządku alfabetycznym oraz pseudohalogenków, które mają tę samą rangę ale też są wymienione w porządku alfabetycznym)

(1)	-Br	bromido		-NCS	izotiocyjanianido
	-Cl	chlorydo		-NCSe	izoselenocyjanianido
	-F	fluorydo		-NCTe	izotellurocyjanianido
	-I	jodydo	(3)	$-NH_2$	amido
(2)	$-N_3$	azydo	(4)	$-NH-NH_2$	hydrazydo
	-CN	cyjanido	(5)	≡N	nitrydo
	-NC	izocyjanido	(6)	=NH	imido
	-NCO	izocyjanianido	(7)	$=NNH_2$	hydrazono

P-67.1.2.3.3 Przedrostki oznaczające chalkogenowe analogi kwasów poprzez zamianę atomów tlenu (w malejącym porządku starszeństwa)

(1)	–OO-	peroksy
(2)	-OS- lub –SO-	tioperoksy (podobnie selenoperoksy, telluroperoksy

(3)	–SS-	ditioperoksy (diselenoperoksy, ditelluroperoksy)
(4)	–SSe- lub –SeS-	selenotioperoksy (podobnie dla innych mieszanych chalkogenów)
(5)	–S- lub =S	tio
(6)	–Se- lub =Se	seleno
(7)	–Te- lub =Te	telluro

P-67.1.2.3.4 Przedrostki oznaczające klasy (w malejącym porządku starszeństwa oprócz halogenków, które mają tę samą rangę ale są cytowane w porządku alfabetycznym oraz pseudohalogenków, które mają tę samą rangę ale są cytowane w porządku alfabetycznym).

(1)	-Br	bromo		-NCS	izotiocyjaniano
	-Cl	chloro		-NCSe	izoselenocyjaniano
	-F	fluoro		-NCTe	izotellurocyjaniano
	-I	jodo	(3)	$-NH_2$	amido
(2)	$-N_3$	azydo	(4)	$-NH-NH_2$	hydrazydo
	-CN	cyjano	(5)	≡N	nitrydo
	-NC	izocyjano	(6)	=NH	imido
	-NCO	izocyjaniano	(7)	$=NNH_2$	hydrazono

P-67.1.2.3.5 Odpowiedni wrostek umieszcza się (w kolejności alfabetycznej, jeśli więcej niż jeden) przed końcówką ‘-owy’ lub ‘-awy’nazwy macierzystej, z pominięciem litery ‘o’ przed samogłoską, z wyjątkiem wrostków ‘tio’, ‘seleno’, ‘telluro’ i ‘perokso’, które są używane jako takie, bez pominięcia litery ‘o’ przed końcówką ‘owy’. W razie potrzeby może być dodana eufoniczna litera ‘o’. Zwielokrotnianie przedrostków poprzez zwielokrotniające przedrostki ‘di’ lub ‘tri” nie zmienia ich pozycji w porządku alfabetycznym.

P-67.1.2.4 Mononuklearne oksokwasy niewęglowe modyfikowane zamianą funkcji

Wstępnie wybrane nazwy opisane w P-67.1.2 używane są do tworzenia preferowanych nazw IUPAC dla związków organicznych. Dokąd co najmniej jedna grupa OH pozostaje w oksokwasie mającym zachowaną nazwę, kwas modyfikowany zamianą funkcji klasyfikowany jest jako kwas i określany nazwą klasową ‘kwas’.

P-67.1.2.4.1 Zamiana funkcji w kwasach wymienionych w P-67.1.2 wyrażana jest wrostkami lub przedrostkami. Podstawienie niekwasowych atomów wodoru wskazywane jest przedrostkami, jeśli niezbędne - z zastosowaniem lokantu *B, N, P, As* lub *Sb*. Tautomery można rozróżniać przez dodawanie jako przedrostków symboli pierwiastków pisanych kursywą, np. *S* lub *O*, do terminu ‘kwas’. Konieczne są nawiasy okragłe do włączenia wrostków modyfikowanych przedrostkiem chalkogenowym, np. ‘tioperoksowy’. W dodatku do wrostków i przedrostków wymienionych w P-

67.1.2.3, przedrostek ‘cyjaniano’ i wrostek ‘cyjanianido’ - dla –OCN stosowane są dla modyfikowania kwasów jak pokazano w P-67.1.2.4.1.3.

P-67.1.2.4.1.1 Przykłady mononuklearnych kwasów niewęglowych modyfikowanych infiksami:

CH_3-B(OH)(SH)	kwas metyloboronotiowy (PIN)
CH_3-B($NHCH_3$)(OH)	kwas *B*,*N*-dimetyloboronoamidowy (PIN)
CH_3-N(OH)(SH)	kwas metyloazonatiowy (PIN)
$(C_2H_5)_2$P(S)SH)	kwas dietylofosfinoditiowy (PIN)
$(CH_3)_2$N-P(O)$(OH)_2$	kwas *N*,*N*-dimetylofosforoamidowy (PIN)
$(C_6H_5)_2$P(=N-CH_3)(OH)	kwas *N*-metylo-*P*,*P*-difenylofosfinoimidowy (PIN)
C_6H_5-P(=N-C_6H_5)(Cl)(SH)	kwas *N*,*P*-difenylofosfonochloridoimidotiowy (PIN)
C_6H_5-P(S)(NH-CH_3)(OH)	*O*-kwas *N*-metylo-*P*-fenylofosfonoamidotiowy (PIN)
$(CH_3)_2$N-P(O)(NCS)(SH)	*S*-kwas *N*,*N*-dimetylofosforoamido(izotiocyjanianido)tiowy (PIN)
$(CH_3)_2$N-P(=N′-C_6H_5)(SCN)(OH)	kwas *N*,*N*-dimetylo-*N*′-fenylofosforoamidoimido-(tiocyjanianidowy) (PIN)
(C_6H_5)P(OH)(SH)	*S*-kwas fenylofosfonatiowy (PIN
(C_6H_5)P≡N)(OH)	kwas fenylofosfononitrydowy (PIN)
(C_6H_5)P(O)(Cl)(OH)	kwas fenylofosfonochlorydowy (PIN
CH_3CH_2 P(Se)$(OH)_2$	*O*,*O*-kwas etylofosfonoselenowy (PIN)
CH_3CH_2 P(O)(OH)(SeH)	*Se*-kwas etylofosfonoselenowy (PIN)
P(=NH)(NH-NH_2)(OH)	kwas fosforohydrazydoimidowy (nazwa pochodząca od wstępnie wybranej nazwy kwas fosforowy)
P(O)(OH)(SH)(SSH)	*S*-kwas fosforo(ditioperokso)tiowy (nazwa pochodząca od wstępnie wybranej nazwy kwas fosforowy)
P(O)$(OH)_2$(OSH)	*O*,*S*-kwas fosforo(tioperoksowy) (nazwa pochodząca od wstępnie wybranej nazwy kwas fosforowy)
As(O)$(OH)(SH)_2$ lub As(S)$(OH)_2$(SH)	kwas arsoroditiowy (nazwa pochodząca od wstępnie wybranej nazwy kwas arsorowy)
As(S)$(OH)_3$	*O*,*O*,*O*-kwas arsorotiowy (nazwa pochodząca od wstępnie wybranej nazwy kwas arsorowy)
$(C_6H_5)_2$As(SH)	kwas difenyloarsorotionawy (PIN)
HO-SO_2-SH	*S*-kwas sulfurotiowy
H_2N-SO_2-OH	kwas sulfamowy
$H_2S_2O_3$	kwas sulfurotiowy
HO-SO_2-NC	kwas sulfuroizocyjanidowy (PIN)
HO-SO_2-NCS	kwas sulfuro(izocyjanianidowy) (PIN);
HO-SO_2-CN	kwas sulfurocyjanidowy (PIN)
HS-SO_2-NH_2	*S*-kwas sulfamotiowy sulfuroamidotiowy)
HS-TeO_2-NH_2	kwas telluroamidotiowy (nazwa pochodząca od wstępnie wybranej nazwy kwas tellurowy)

P-67.1.2.4.1.2 Przykłady nazw mononuklearnych kwasów niewęglowych modyfikowanych przedrostkami:

$Si(OH)_3(SH)$	kwas tiokrzemowy (nazwa pochodząca od wstępnie wybranej nazwy kwas krzemowy)
S=N-OH	*O*-kwas tioazotawy (nazwa pochodząca od wstępnie wybranej nazwy kwas azotawy)
$Cl(S)_2$-OH	*O*-kwas ditiochlorowy (nazwa pochodząca od wstępnie wybranej nazwy kwas chlorowy)

P-67.1.2.4.1.3 Specyficzne stosowanie przedrostka ‘cyjaniano’ i wrostka ‘cyjanianido’

Grupa –OCN podłączona do centralnego atomu mononuklearnego oksokwasu niewęglowego tworzy wiązanie bezwodnikowe (patrz P-67.1.3.3). Aby uszanować porządek starszeństwa klas grupa ta jest używana w nomenklaturze zamiennej funkcji do nazywania kwasów; kwasy są starsze od anhydrydów. Przedrostki ‘cyjaniano’, ‘tiocyjaniano’, ’selenocyjaniano’ i ‘tellurocyjaniano’ patrz P-65.2.2.

Przykłady:

CH_3-P(OCN)OH	kwas metylofosfocyjanianidowy (PIN)
$P(O)(OCN)_2OH$	kwas fosforodicyjanianidowy (PIN)
$Si(OCN)(OH)_3$	kwas cyjanianokrzemowy (PIN)

P-67.1.2.4.2 Przewodnik tworzenia nazw w nomenklaturze zamiennej funkcji

Nazwy fosfonawy, fosfinawy, fosfonowy i fosfinowy (podobnie dla kwasów arsenowego, antymonowego i azotowych) mogą być używane tylko wtedy gdy atom P, As lub Sb połączony jest z atomami wodoru, węgla lub innym atomem macierzystego wodorku, takim jak N, As, Si. Tak więc, $(C_6H_5)P(O)(Cl)(OH)$ to kwas fenylofosfonochlorydowy a nie fenylochlorofosfonowy; $(C_5H_{10}N)$-P(O)Cl(OH) to kwas piperydyn-1-ylofosforochlorydowy a nie chloropiperydyn-1-ylofosfonowy, a $ClP(O)(OH)_2$ to kwas fosforochlorydowy a nie chlorofosforowy.

P-67.1.2.5 Halogenki i pseudohalogenki kwasowe

P-67.1.2.5.1 Z wyjątkiem kwasów boronowych i kwasu krzemowego preferowane nazwy IUPAC halogenków i pseudohalogenków kwasowych tworzy się dodając klasową nazwę halogenku lub pseudohalogenku do nazwy kwasu. Wyjątkowo, w zgodzie z tradycją i rekomendowaną nomenklaturą związków nieorganicznych (odn. 12), halogenki i pseudohalogenki z identycznymi atomami lub grupami i otrzymane z kwasów fosforowego, siarkowego, selenowego i tellurowego tworzone są przez dodanie nazwy klasowej do nazwy grupy acylowej ‘fosforyl’, ‘sulfuryl’, ‘sulfamoil’, ‘selenonyl’ i ‘telluronyl’, a nie do nazwy samego kwasu. Zgodnie z porządkiem starszeństwa halogenków i pseudohalogenków, nazwy tworzy się na podstawie starszej klasy, co pokazano w P-67.1.2.1.

Preferowane nazwy IUPAC halogenków i pseudohalogenków kwasowych pochodnych kwasów boronowych i kwasu krzemowego tworzy się na bazie nazw macierzystych wodorków, odpowiednio, boranu i silanu

.

Przykłady:

CH_3-N(O)Cl_2	dichlorek metyloazonowy (PIN)
P(O)$(NCO)_3$	triizocyjanian fosforylu (PIN)
$(C_6H_5)_2$P-Cl	chlorek difenylofosfinawy (PIN)
(C_6H_5)Sb-NCO	izocyjanian difenylostibinawy (PIN)
(C_6H_5)P-Cl_2	dichlorek difenylofosfonawy (PIN)
(C_6H_5)-PBrCl	bromek-chlorek fenylofosfonawy (PIN)
$(C_6H_5)_2$P(=N-C_6H_5)Cl	chlorek *N*,*P*-trifenylofosfonoimidowy (PIN)
$(CH_3CH_2)_2$ P(S)Cl	chlorek dietylofosfinotiowy (PIN)
(C_6H_5)P(O)Cl_2	dichlorek fenylofosfonowy (PIN)
(CH_3CH_2) P(O)[N$(CH_3)_2$]Cl	chlorek *P*-etylo-*N*,*N*-dimetylofosfonoamidowy (PIN)
$(CH_3)_2$N-P(O)(NCO)Cl	chlorek *N*,*N*-dimetylofosforoamidoizocyjanianidowy (PIN)
HP(O)$(NCO)_2$	diizocyjanian fosfonowy (PIN)
P(=NH)$(NCS)_3$	triizotiocyjanian fosforoimidowy (PIN)
$(CH_3)_2PN_3$	azydek dimetylofosfinawy
$SO_2(NCO)_2$	diizocyjanian sulfurylu (PIN)
S(=NH-CH_3)Cl_2	dichorek *N*-metylosulfuroimidawy (PIN)
F-SO_2-NCO	fluorek sulfuroizocyjanianidowy (PIN)
F-S(=NH)(NCO)	fluorek sulfuroimidoizocyjanianidawy (PIN)
CH_3-NH-SO_2Cl	chlorek *N*-metylosulfamoilu (PIN)

P-67.1.2.5.2 Preferowane nazwy IUPAC halogenków kwasów boronowych i kwasu krzemowego są nazwami podstawnikowymi.

Przykłady

C_6H_5-B(Cl)(Br)	bromo(chloro)fenyloboran (PIN) bromek-chlorek fenyloboronowy chlorek fenyloboronobromidowy
CH_3-$SiCl_3$	trichloro(metylo)silan (PIN)
$SiCl_4$	tetrachlorek krzemu tetrachlorosilan (nazwa wstepnie wybrana)

P-67.1.2.6 Amidy i hydrazydy

Amidy i hydrazydy nazywa się w nomenklaturze klasowo-funkcyjnej zastępując wyraz ‘kwas’ w nazwie odpowiedniego kwasu wyrazem ‘amid’ lub ‘hydrazyd’. Amidy i hydrazydy kwasu azotowego i azotawego dyskutowane są w P-67.1.2.6.2. Preferowane nazwy IUPAC amidów i hydrazydów kwasów boronowych i kwasu krzemowego są wyjątkami (patrz P-67.1.2.6.2), podobnie jak kwas azorawy, azynowy i azonawy, które są nazwami poliazanów.

P-67.1.2.6.1 Preferowane nazwy IUPAC amidów i hydrazydów oznaczane są nazwą klasową ‘amid lub ‘hydrazyd’**:**

a) gdy wszystkie grupy –OH w odpowiednim kwasie zostaną zastąpione grupami $–NH_2$ lub $–NH-NH_2$, i

b) gdy amid lub hydrazyd stanowią główną grupę funkcyjną zgodnie z następującym porządkiem starszeństwa:

Br, Cl, F, N_3, CN, NC, NCO, OCN, NH_2 (amid), $\overset{1}{N}H\overset{2}{N}H_2$ (hydrazyd)

Uwaga: Ten porządek nie jest całkiem taki sam jak stosowany przez CAS (gdzie amid znajduje się po halogenach , ale poprzedza pseudohalogeny) ale jest zgodny z porządkiem klas związków w P-41.

Podstawniki na atomach azotu oznaczane są literowymi lokantami pisanymi kursywą, takimi jak *N* (jeśli to konieczne, primowanymi lub podwójnie primowanymi) jako dodatek do pisanych kursywą lokantów literowych *‘P’, ‘As’* i ‘*Sb*.

Lokantami opisującymi hydrazydy są 1 i 2, jeśli potrzebne primowane i podwójnie primowane..

Przykłady:

$[(CH_3)_2N]_3PO$	triamid heksametylofosforowy (PIN) heksametylofosforoamid (nie tris(dimetyloamid) fosforowy)
$(CH_3)_2P(O)[N(CH_{3)2}]$	amid *N*,*N*,*P*,*P*-tetrametylofosfinowy (PIN) (nie dimetyloamid dimetylofosfinowy)
C_6H_5-P(O)$(NHCH_3)_2$	diamid *N*,*N*′-dimetylo-*P*-fenylofosfonowy (PIN) (nie bis(metyloamid) fenylofosfonowy)

C_6H_5-P(S)$[NH(CH_3)_2]_2$

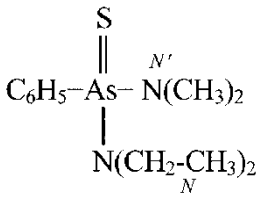
diamid *N*,*N*,*N*′,*N*′-tetrametylofosfonotiowy (PIN)

C_6H_5-Sb(S)$[NH(CH_3)_2][N(CH_2\text{-}CH_3)_2]$

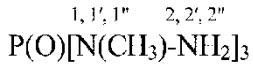
diamid *N*,*N*-dietylo-*N*′,*N*′-dimetylo-*Sb*-fenylostybonotiowy (PIN)

$(CH_3)_2N$-P(O)Cl_2

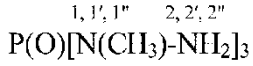
dichlorek *N*,*N*-dimetylofosforoamidowy (PIN)



diamid *N*,*N*-dietylo-*N*′,*N*′-dimetylo-*As*-fenyloarsonotiowy (PIN)

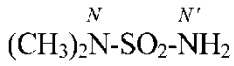


trihydrazyd 1,1′,1′′-trimetylofosforowy

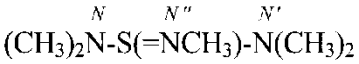


trihydrazyd 2,2,2′,2′, 2′′, 2′′-heksametylofosforotiowy (PIN)
(nie tris(2,2-dimetylohydrazyd) fosforotiowy)

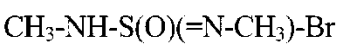
diamid *N*- metylosulfurawy (PIN)



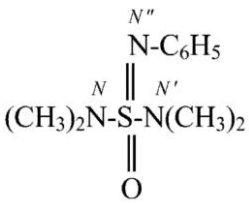
diamid *N*,*N*-dimetylosulfurowy (PIN)
N,*N*-dimetylosulfamid



diamid pentametylosulfuroimidawy (PIN)



bromek *N*,*N*′-dimetylosulfuroamidoimidowy (PIN)



diamid *N*,*N*,*N*′,*N*′-tetrametylo-*N*-fenylosulfuroimidowy (PIN)

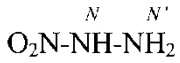
P-67.1.2.6.2 Preferowane nazwy IUPAC amidów i hydrazydów kwasów boronowych i kwasu krzemowego są nazwami podstawnikowymi opartymi na wstępnie wybranych nazwach macierzystych wodorków: ‘boran’ i ‘silan’.

Przykłady:

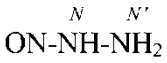
$H_2B\text{-}NH_2$	boranoamina (nazwa pochodna od wstępnie wybranej nazwy boran) (nie amid borinowy)
$B(NH_2)_3$	boranotriamina (nazwa pochodna od wstępnie wybranej nazwy boran) (nie triamid borowy)
$B(NH\text{-}NH_2)_3$	1,1′,1″-boranotriylotrihydrazyna (nazwa pochodna od wstępnie wybranej nazwy boran) (nie trihydrazyd borowy)
$Si(NH_2)_4$	silanotetraamina (nazwa pochodna od wstępnie wybranej nazwy silan) (nie tetraamid krzemowy)
$Si(NH\text{-}NH_2)_4$	1,1′,1″,1‴-silanotetrahydrazyna (nazwa pochodna od wstępnie wybranej nazwy silan) (nie tetrahydrazyd krzemowy)

P-67.1.2.6.3 Amidy i hydrazydy kwasów azotowego i azotawego

Nitroaminy są amidami kwasu azotowego (patrz odn. 23). Ta klasa tworzona jest z ‘nitramidu’ (skrócona forma angielskiej nazwy nitric amide), $NO_2\text{-}NH_2$, a nazwy jego pochodnych tworzy się przez podstawienie. Nitrozoaminy są amidami kwasu azotawego, $NO\text{-}NH_2$ (patrz odn. 23), nazwy



(I)



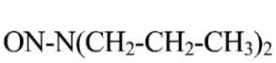
(II)

jego pochodnych tworzy się przez podstawienie. Kwas azotowy i azotawy są wstępnie wybranymi nazwami, patrz P-12.

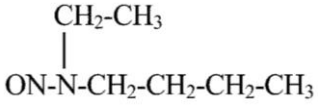
Podobnie, hydrazyd azotowy (I) i hydrazyd azotawy (II) są wstępnie wybranymi nazwami używanymi jako struktury macierzyste do tworzenia preferowanych nazw IUPAC.

> Preferowane nazwy IUPAC dla amidów i hydrazydów kwasów azotowego i azotawego są systematycznie tworzone na bazie azotowego lub azotawego amidu i hydrazydu, w zgodzie z porządkiem starszeństwa klas, a nie jako nitro- i nitrozoaminy; te ostatnie nazwy mogą być używane w ogólnej nomenklaturze

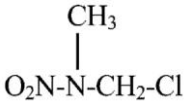
Przykłady:



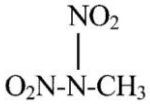
amid *N*,*N*-dipropyloazotawy (PIN)
N-nitrozo-*N*-propylopropano-1-amina



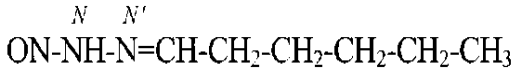
amid *N*-butylo-*N*-etyloazotawy (PIN)
N-etylo-*N*-nitrozobutano-1-amina



N-(chlorometylo)-*N*-metylonitroamid (PIN)
1-chloro-*N*-metylo-*N*-nitrometanoamina



N-metylo-*N*-nitronitroamid (PIN)
N,*N*-dinitrometanoamina



hydrazyd *N*′-heksylidenoazotawy (PIN)

P-67.1.3 Sole, estry i bezwodniki mononuklearnych oksokwasów nie węglowych

Metodologia dyskutowana w tej sekcji jest stosowalna do wszystkich mononuklearnych oksokwasów, bez względu na to czy mają nazwy zachowane czy nazwy z użyciem przedrostków lub wrostków.

P-67.1.3.1 Sole
P-67.1.3.2 Estry
P-67.1.3.3 Bezwodniki

P-67.1.3.1 Sole mononuklearnych oksokwasów niewęglowych

Nazwy obojętnych soli mononuklearnych oksokwasów niewęglowych tworzy się wymieniając nazwy anionu(ów) a następnie kationu(ów) jako osobnych słów. Nazwy anionów tworzy się zastępując końcówki ‘owy’ w kwasie na końcówkę ‘an’ lub ‘ian’, a końcówki ‘awy’ na końcówkę ‘yn’ lub ‘in’i pomijając termin ‘kwas’. Różne kationy wymienia się w porządku alfabetycznym.

Przykłady:

$Na_2(CH_3\text{-}PO_2)$ metylofosfonin disodu (PIN)

$K[(CH_3)_2As(O)O]$ dimetyloarsynian potasu (PIN)

Sole wielozasadowych mononuklearnych oksokwasów niewęglowych nazywa się w ten sam sposób jak sole obojętne, a pozostający kwasowy atom(y) wodoru określa się jako ‘wodór’ (lub ‘diwodór’, etc., w zależności od potrzeb) i umieszcza pomiędzy nazwą anionu (ów) i nazwą kationu (ów), od którego są oddzielane odstępem. umieszczany jest bezpośrednio przed nazwą anionu, bez odstępu, w celu zaznaczenia, że jest on częścią anionu.

Przykład:

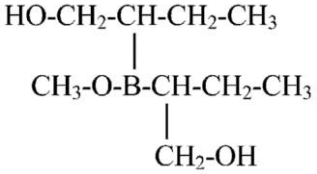
$Na^+[B(OH)(OCN)(O)^-$ borocyjanianid wodoru sodu

P-67.1.3.2 Estry mononuklearnych niewęglowych oksokwasów

Estry mononuklearnych niewęglowych oksokwasów nazywa się tak samo jak estry kwasów organicznych (patrz P-65.6.3.2). Po nazwie anionu grupy alkilowe i arylowe wymienia się jako osobne wyrazy, w kolejności alfanumerycznej (jeśli są więcej niż jedna). Częściowe (kwaśne) estry kwasów wielozasadowych nazywa się wymieniając po nazwie anionu, jako osobne słowo, grupy alkilowe, arylowe, itd. poprzedzone osobnym słowem ‘wodór’ (jeśli konieczne z odpowiednimi przedrostkami zwielokrotniającymi oznaczającymi liczbę wolnych grup kwasowych). Sole kwaśnych estrów nazywa się wymieniając nazwę anionu na początku nazwy grupy organicznej; pozostające grupy kwasowe wskazuje się słowem ‘wodór’, jak opisano powyżej. Specyfika strukturalna estrów chalkogenowych analogów mononuklearnych niewęglowych oksokwasów jest zaznaczana za pomocą pisanych kursywą symboli pierwiastków *O*, *S*, *Se* i *Te* poprzedzających nazwę grupy.

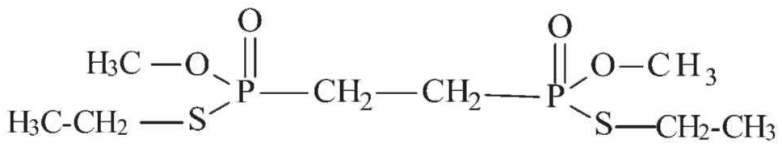
Przykłady:

CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-O-NO	azotyn pentylu (PIN)
CH_3-S-NO_2	tioazotan *S*-metylu (PIN)
$(C_6H_5)_2$P-O-CH_3	difenylofosfinin metylu (PIN)
CH_3-P(Cl)(S-CH_2-CH_3)	metylofosfonochlorydotiin etylu (PIN)
CH_3-P(NH-CH_3)(OCH_3)	*N*,*P*-dimetylofosfonoamidyn metylu (PIN)
P(OCH_3)$_3$	fosforyn trimetylu (PIN)
P(Cl)[N(CH_3)$_2$](O-CH_3)	*N*,*N*-dimetylofosforoamidochloridyn metylu (PIN)
P(O)(OCH_3)$_3$	fosforan trimetylu
P(O)(O-C_2H_5)(O-CH_3)(O-C_6H_5)	fosforan etylu-fenylu metylu (PIN)
P(O)(O-CH_3)(OH)$_2$	fosforan diwodoru-metylu (PIN)
C_6H_5-HAs(S)(O-CH_3)	fenyloarsynotian *O*-metylu (PIN)
CH_3-O-P(O)(OH)-O^- Na^+	fosforan wodoru-metylu-sodu (PIN)
HP(O)(O-CH_3)$_2$	fosfonian dimetylu (PIN)
(CH_3-CH_2)$_2$P(S)(S-CH_2-CH_3)	dietylofosfinoditian etylu (PIN)
(CH_3)$_2$As(O)(S-CH_3)	dimetyloarsynotian *S*-metylu (PIN)
CH_3P(O)(O- CH_2-CH_3)$_2$	metylofosfonian dietylu (PIN)
C_6H_5P(O)(O-CH_3)(S-CH_2-CH_3)	fenylofosfonotian *S*-etylu-*O*-metylu (PIN)
C_6H_5P(O)(Cl)(O-CH_3)	fenylofosfonochlorydan metylu (PIN)
(CH_3)$_2$N-P(O)(O-CH_3)$_2$	*N*,*N*-dimetylofosforoamidan dimetylu (PIN)
(CH_3-CH_2)$_2$NP(O)(NCS)(O-CH_2-CH_3)	*N*,*N*-dietylofosforoamido(izotiocyjanianid) etylu (PIN)
As(O)(F)(O-CH_3)$_2$	arsorofluorydan dimetylu (PIN)
Sb(O)(F_2)(S-CH_3)	styborofluorydotian *S*-metylu
(CH_3)$_2$B-O-C_6H_5	dimetyloborynian fenylu (PIN)
CH_3-O-SO_2-OH	siarczan wodoru-etylu (PIN)
C_6H_5-O-F	hypofluoryn fenylu (PIN)
CH_3-S-Cl	tiohypochloryn metylu (PIN)
CH_3-CO-CH_2-CH_2-O-BrO_2	brominian 3-oksobutylu (PIN)



bis(1-hydroksybutan-2-yl)borynian metylu (PIN)

$Si(S\text{-}CH_3)_3(O\text{-}CH_2\text{-}CH_3)$ tritiokrzemian *O*-etylu-*S*,*S*,*S*-trimetylu (PIN)



P,*P*′-(etano-1,2-diylo)bis(fosfonotian) *S*,*S*′-dietylu-*O*,*O*′-dimetylu

P-67.1.3.3 Anhydrydy mononuklearnych niewęglowych oksokwasów

Neutralne anhydrydy tworzone przez kwasy określane przyrostkami i mononuklearne niewęglowe oksokwasy opisane w P-67.1.1 nazywa się tak samo jak anhydrydy tworzone przez kwasy karboksylowe i kwasy siarki nazywane przyrostkami (patrz P-65.7. Po nazwie klasowej: ‘anhydryd’, z przedrostkiem liczbowym oznaczającym liczbę wiązań anhydrydowych (nie stosuje się przedrostka ‘mono’), wymienia się w porządku alfabetycznym nazwy kwasów; takie nazwy prowadzą do preferowanych nazw IUPAC. Nazwy tworzone przez grupy acylowe podstawiające mononuklearne oksokwasy fosforu, arsenu i antymonu, modyfikowane dodatkiem końcówki ‘an’ mogą być stosowane w ogólnej nomenklaturze. Anhydrydy tworzone przez halogenowe oksokwasy z kwasami karboksylowymi i kwasami siarki wskazuje się przyrostkami.

Kwasowe anhydrydy nazywa się tak jak opisano w P-67.3.1 stosując najstarszy kwas jako macierzysty, albo używając systematyczną nomenklaturę podstawnikową.

Przykłady:

$(CH_3)_2B\text{-}O\text{-}CO\text{-}CH_3$	anhydryd octowo-dimetyloborynowy (PIN)
$CH_3\text{-}CO\text{-}O\text{-}As(O)(CH_3)_2$	anhydryd octowo-dimetyloarsynowy (PIN) dimetyloarsynian acetylu
$B(O\text{-}CO\text{-}CH_3)_3$	trianhydryd octowo-borowy
$[(CH_3)_2CH]_2Sb\text{-}S\text{-}C(S)\text{-}N(CH_2\text{-}CH_3)_2$	tioanhydryd dietylokarbamotiowo-di(propan-2-ylo) stybinawy (PIN)
$C_6H_5\text{-}CO\text{-}O\text{-}I$	anhydryd benzoesowo-hypojodawy (PIN)
$(CH_3)_2B\text{-}O\text{-}O\text{-}B(CH_3)_2$	peroksyanhydryd dimetyloborynowy (PIN)
$B(OCN)_3$	trianhydryd borowo-cyjanowy (PIN)
$CH_3\text{-}HP(O)(OCN)$	anhydryd cyjanowo-metylofosfinowy

P-67.1.4 Przedrostki podstawników pochodzących z mononuklearnych niewęglowych oksokwasów

P-67.1.4.1 Podstawniki pochodne mononuklearnych kwasów azotu, fosforu,

arsenu i antymonu
P-67.1.4.2 Podstawniki pochodne kwasu borowego i krzemowego
P-67.1.4.3 Podstawniki pochodne kwasu azotowego i azotawego
P-67.1.4.4 Podstawniki pochodne kwasów siarki, selenu i telluru
P-67.1.4.5 Podstawniki pochodne kwasów halogenowych

P-67.1.4.1 Podstawniki pochodne mononuklearnych kwasów azotu, fosforu, arsenu i antymonu

P-67.1.4.1.1 Wstępnie wybrane przedrostki
P-67.1.4.1.2 Podstawniki dla nomenklatury ogólnej
P-67.1.4.1.3 Mieszane i złożone podstawniki

P-67.1.4.1.1 Wstępnie wybrane przedrostki

Przedrostki podstawników utworzonych z mononuklearnych niewęglowych oksokwasów mają nazwy zachowane i systematyczne odpowiadające prostym lub zespolonym grupom acylowym. Wstępnie wybrane przedrostki tworzy się z zastosowaniem porządku starszeństwa w podanej kolejności aż do uzyskania rostrzygnięcia.

P-67.1.4.1.1.1 Zachowane nazwy dla grup podstawników pochodzących z mononuklearnych niewęglowych oksokwasów;

Kilka nazw oznaczających monowalencyjne grupy kwasowe jest zachowanych. Te nazwy są nazwami wstępnie wybranymi bez podstawienia lub dla analogów chalkogenowych gdy pozycja atomów chalkogenu wprowadzanego przez zamianę funkcji jest nieustalona, albo niepotrzebne jest określanie ich pozycji: atomy chalkogenu oznaczane są przedrostkami.

Kwas	Pochodny wstępnie wybrany przedrostek
$-N(O)(OH)_2$	azono (wstępnie wybrany przedrostek)
$-P(O)(OH)_2$	fosfono (wstępnie wybrany przedrostek)
$-As(O)(OH)_2$	arsono (wstępnie wybrany przedrostek)
$-Sb(O)(OH)_2$	stybono (wstępnie wybrany przedrostek)
$-P(O)(OH)(SH)$ lub $-P(S)(OH)_2$	tiofosfono (wstępnie wybrany przedrostek)
$-P(S)(SH)_2$	tritiofosfono (wstępnie wybrany przedrostek)

P-67.1.4.1.1.2 Podstawowe grupy acylowe dla podstawników pochodzących z mononuklearnych niewęglowych oksokwasów

Przedrostki dla grup acylowych tworzy się usuwając wszystkie grupy –OH z mononuklearnego niewęglowego oksokwasu o ogólnej strukturze $E(=O)(OH)_3$, $R\text{-}E(=O)(OH)_2$ lub $R,R'E(=O)(OH$, gdzie R i R′ = H lub grupa organylowa. Nazwy grup acylowych otrzymanych z nazw kwasów (modyfikowanych lub nie zamianą funkcji) poprzez usunięcie wszystkich grup hydroksylowych lub ich chalkogenowych analogów, tworzy się przez opuszczając słowo ‘kwas’ i zastępując końcówkę ‘owy’ końcówką ‘oil’, za wyjątkiem ‘nitroryl’ –N(O)<, ‘fosforyl’ –P(O)<, ‘arsoryl’ –As(O)< i ‘styboryl’ -Sb(O)<. Utworzone w ten sposób przedrostki są preferowanymi przedrostkami IUPAC.

Na przykład, grupa fosforylowa –P(O)< pochodzi od kwasu fosforowego $P(O)(OH)_3$, *S*-kwasu fosforotiowego $P(O)(OH)_2(SH)$, kwasu *S*,*S*-fosforoditiowego $P(O)(SH)_2(OH)$ lub kwasu *S*,*S*,*S*-fosforotritiowego $P(O)(SH)_3$.

Przedrostek 'nitroryl' (a nie 'azoryl') pochodzący od hipotetycznego kwasu nitrorowego $N(O)(OH)_3$ jest zalecany od roku 1993 (patrz R-3.3, odn. 2).

Przykłady:

	Kwas	**Pochodny wstępnie wybrany przedrostek**	
$N(O)(OH)_3$	kwas nitrorowy (hipotetyczny, nazwa wstępnie wybrana)	–N(O)<	nitroryl (przedrostek wstępnie wybrany)
$P(O)(OH)_3$	kwas fosforowy (nazwa wstępnie wybrana)	–P(O)<	fosforyl (przedrostek wstępnie wybrany)
$As(O)(OH)_3$	kwas arsorowy (nazwa wstępnie wybrana) (nie kwas arsenowy)	–As(O)<	arsoryl (przedrostek wstępnie wybrany) (nie arsenyl)
$Sb(O)(OH)_3$	kwas styborowy (nazwa wstępnie wybrana) (nie kwas antymonowy)	–Sb(O)<	styboryl (przedrostek wstępnie wybrany) (nie antymonyl)
$NH(O)(OH)_2$	kwas azonowy (nazwa wstępnie wybrana)	NH(O)<	azonoil (przedrostek wstępnie wybrany)
$H_2N(O)(OH)$	kwas azynowy (nazwa wstępnie wybrana)	$H_2N(O)$–	azynoil (przedrostek wstępnie wybrany)
$HP(O)(OH)_2$	kwas fosfonowy (nazwa wstępnie wybrana)	$PH_2(O)$<	fosfonoil (przedrostek wstępnie wybrany)
$H_2P(O)(OH)$	kwas fosfinowy (nazwa wstępnie wybrana)	$PH_2(O)$–	fosfinoil (przedrostek wstępnie wybrany) (nie fosfinyl)
$AsH(O)(OH)_2$	kwas arsorowy (nazwa wstępnie wybrana)	AsH(O)<	arsonoil (przedrostek wstępnie wybrany)
$AsH_2(O)OH$	kwas arsynowy (nazwa wstępnie wybrana)	$AsH_2(O)$–	arsynoil (przedrostek wstępnie wybrany) (nie arsynyl)
$SbH(O)(OH)_2$	kwas stybonowy (nazwa wstępnie wybrana)	SbH(O)<	stybonoil (przedrostek wstępnie wybrany)

$SbH_2(O)OH$	kwas stybinowy (nazwa wstępnie wybrana)	$SbH_2(O)–$	stybinoil (przedrostek wstępnie wybrany)

P-67.1.4.1.1.3 Nazwy podstawionych podstawowych grup acylowych otrzymanych z mononuklearnych niewęglowych oksokwasów

Nazwy podstawionych podstawowych grup acylowych tworzy się bezpośrednio z nazw kwasów utworzonych metoda opisaną w P-67.1.4.1.1. (b) Preferowane nazwy IUPACgrup acylowych to te, które tworzone są z preferowanych nazw kwasów. Addycja atomów wodoru do grup acylowych metodą powiązania, opisaną w P-67.1.4.1.2, jest niedozwolona.

Przykłady:

Kwas	Pochodny wstępnie wybrany przedrostek
CH_3-P(O)$(OH)_2$ kwas metylofosfonowy (PIN)	CH_3-P(O)< metylofosfonoil (preferowany przedrostek)
CH_3-CH_2-SbH(O)OH kwas etylostybinowy (PIN)	CH_3-CH_2-SbH(O)- etylostybinoil (preferowany przedrostek)
C_6H_5-As(CH_3)(O)OH kwas fenylometyloarsynowy (PIN)	C_6H_5-As(CH_3)(O)- fenylo(metylo)arsynoil (preferowany przedrostek)

P-67.1.4.1.1.4 Nazwy grup acylowych pochodzących od mononuklearnych niewęglowych oksokwasów modyfikowane zgodnie z nomenklaturą zamienną funkcji

Nazwy preferowanych przedrostków IUPAC tworzy się zgodnie z metodologią omówioną w rozdziale P-65.2.1.5, nazywania grup acylowych wywodzących się z kwasów karbonowych, których nazwy tworzy się za pomocą wrostków i przedrostków zgodnie z zasadami nomenklatury zamiennej funkcji. Wszystkie wymienione w Tabeli 1.6 i omówione w P-65.2.1.5 wrostki i przedrostki są dozwolone. Ta metoda zastosowana do mononuklearnych niewęglowych oksokwasów B, N, P, As lub Sb polega na przeprowadzeniu w pierwszej kolejności zamiany funkcji w kwasie a następnie usunięciu wszystkich pozostałych grup –OH. We wstępnie wybranych nazwach stosuje się wrostki do wskazania zamiany funkcji. Nazwy, w których stosuje się przedrostki do przeprowadzenia zamiany funkcji mogą być wykorzystane w ogólnej nomenklaturze.

Przykłady:

Kwas	Pochodny wstępnie wybrany przedrostek
P(S)$(OH)_3$ *O,O,O*-kwas fosforotiowy (wstępnie wybrana nazwa) *O,O,O*-kwas tiofosforowy	>P(S)- fosforotioil (wstępnie wybrany przedrostek) tiofosforyl
As(=NH)$(OH)_3$ kwas arsoroimidowy	>As(=NH)- arsoroimidoil

(wstępnie wybrana nazwa)
kwas imidoarsorowy

(wstępnie wybrany przedrostek)
imidoarsoryl

$Sb(=NNH_2)(OH)_3$
kwas styborohydrazonowy
(wstępnie wybrana nazwa)
kwas hydrazonostyborowy

$>Sb(=NNH_2)$-
styborohydrazonoil
(wstępnie wybrany przedrostek)
hydrazonostiboroil

$NH(S)(OH)_2$
kwas azonotiowy
(wstępnie wybrana nazwa)
kwas tioazonowy

>NH(S)
azonotioil
(wstępnie wybrany przedrostek)
tioazonoil

$PH_2(=NH)(OH)$
kwas fosfinoimidowy
(wstępnie wybrana nazwa)
kwas imidofosfinowy

$-PH_2(=NH)$
fosfinoimidoil
(wstępnie wybrany przedrostek)
imidofosfinoil

$(CH_3)_2P(Se)(OH)$
kwas dimetylofosfinoselenowy (PIN)

$(CH_3)_2P(Se)$-
dimetylofosfinoselenoil
(preferowany przedrostek)

C_6H_5-P(O)Cl(OH)
kwas fenylofosfonochlorydowy (PIN)
kwas fenylo(chlorofosfonowy)

C_6H_5-P(O)(Cl)-
fenylofosfonochlorydoil
(preferowany przedrostek)
fenylo(chlorofosfonoil)

$P(\equiv N)(OH)_2$
kwas fosforonitrydowy
(wstępnie wybrana nazwa)
kwas nitrydofosforowy

$>P(\equiv N)$
fosforonitrydoil
(wstępnie wybrany przedrostek)
nitrydofosforyl

$P(=NH)(NHNH_2)(OH)_2$
kwas fosforohydrazydoimidowy
(wstępnie wybrana nazwa)
kwas hydrazydoimidofosforowy

$>P(=NH)(NHNH_2)$
fosforohydrazydoimidoil
(wstępnie wybrany przedrostek)
hydrazydoimidofosforyl

$P(O)Cl_2(OH)$
kwas fosforodichlorydowy
(wstępnie wybrana nazwa)
kwas dichlorofosforowy

$P(O)Cl_2$-
fosforodichlorydoil
(wstępnie wybrany przedrostek)
dichlorofosforyl

$(CH_3)_2N$-P(O)$(OH)_2$
kwas dimetylofosforoamidowy (PIN)
kwas (dimetyloamido)fosforowy

$(CH_3)_2N$-P(O)<
dimetylofosforoamidoil
(preferowany przedrostek)
(dimetyloamido)fosforyl

$P(O)(OH)_2(OOH)$	>P(O)(OOH)
kwas fosforoperoksowy	fosforoperoksoil
(wstępnie wybrana nazwa)	(wstępnie wybrany przedrostek)
kwas peroksyfosforowy	(hydroperoksy)fosforyl
$P(O)(OH)_2(OSH)$ lub $P(O)(OH)_2(SOH)$	>P(O)(OSH) lub >P(O)(SOH)
kwas fosforo(tioperoksowy)	fosforotioperoksoil
(wstępnie wybrana nazwa)	(wstępnie wybrany przedrostek)
kwas (tioperoksy)fosforowy	(tiohydroperoksy)fosforyl

P-67.1.4.1.1.5 Nazwy preferowanych lub wstępnie wybranych przedrostków grup acylowych podstawionych grupami hydroksylowymi lub ich chalkogenowych i peroksowych analogów

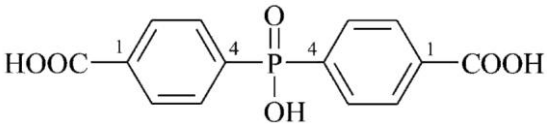
Operacja powiązania jest zalecaną metodą do przywracania grup i ich analogów chalkogenowych w podstawnikach lub w grupach, które nie są traktowane jako wrostki w nomenklaturze zamiennej funkcji, takich jak –OR, -SR, itd. Ważne jest, aby przestrzegać procedurę powiązania, która jest operacją addycji obejmująca tylko grupy acylowe. Dozwolone są następujące grupy acylowe: podstawowe grupy acylowe opisane w P-67.1.4.1.1.2, podstawione podstawowe grupy acylowe omówione w P-67.1.4.1.1.3 i grupy acylowe modyfikowane zgodnie z nomenklaturą zamienną funkcji przedstawione w P-67.1.4.1.1.4.powyżej. Podstawienie atomu wodoru połączonego z centralnym atomem (podstawialny atom wodoru) w podstawowej grupie acylowej, opisane w P-67.1.4.1.1.2 powyżej, nie jest dozwolone w preferowanych nazwach IUPAC.

Ta metoda nie jest zalecana do generowania przedrostków wymienionych w P-67.1.4.1.1.1 powyżej.

.

Przykłady:

-NH(O)(OH)	hydroksyazanoil (wstępnie wybrany przedrostek)
$-P-(Se)(OCH_3)_2$	dimetoksyfosforoselenoil (PIN) dimetoksy(selenofosforyl)
-P(O)(OH)(SH)	hydroksy(sulfanylo)fosforyl (wstępnie wybrany przedrostek)
$-P(O)(SH)_2$	bis(sulfanylo)fosforyl
-PH(O)(SeH)	selanylofosfonoil (wstępnie wybrany przedrostek)
-PH(S)(SH)	sulfanylofosfonotioil (wstępnie wybrany przedrostek) sulfanylo(tiofosfonoil)
>P(O)(OSH)	(sulfanyloksy)fosforyl (wstępnie wybrany przedrostek) (*SO*-tiohydroperoksy)fosforyl
>P(S)(SOH)	(hydroksysulfanylo)fosforotioil (wstępnie wybrany przedrostek) (*OS*-tiohydroperoksy)fosforotioil
CH_3-P(O)(OH)-	hydroksy(metylofosfonoil) (PIN)



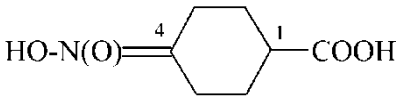
kwas 4,4′-(hydroksyfosforylo)dibenzoesowy (PIN)

P-67.1.4.1.1.6 Nazwy podstawnikowe grup pochodzących od mononuklearnych niewęglowych oksokwasów

Nomenklaturę podstawnikową opartą na macierzystych wodorkach BH_3, PH_3, AsH_3, SbH_3, PH_5, AsH_5, SbH_5 stosuje się do generowania nazw podstawników, dla których nazwy grup acylowych nie mogą być utworzone według reguł opisanych w podrozdziałach od P- 67.1.4.1.1.1 do P-67.1.4.1.1.5 dla odpowiednich kwasów As i Sb. Nomenklaturę podstawnikową stosuje się również w celu wskazania różnego typu wolnych walencyjności, na przykład typu ‘yliden’ zamiast ‘diyl’‘zachowaną w podstawniku pochodzącym od kwasu według kryteriów (b) i (d).

Przykłady:

$-P(OH)_2$	dihydroksyfosfanyl (wstępnie wybrany przedrostek)
-AsH(OH)	hydroksyarsanyl (wstępnie wybrany przedrostek)
-AsHCl	chloroarsanyl (wstępnie wybrany przedrostek)
$-P(NH_2)_2$	diaminofosfanyl (wstępnie wybrany przedrostek)
>Sb(OH)	hydroksystybanodiyl (wstępnie wybrany przedrostek)
=P(OH)	hydroksyfosfanylideno (wstępnie wybrany przedrostek)
$=B(OCH_3)$	metoksyboranylideno (preferowany przedrostek)
$-P-(O-CH_3)_2$	dimetoksyfosfanyl (preferowany przedrostek)
=P(O)(OH)	hydroksydroksy(okso)-λ^5-fosfanylideno (wstępnie wybrany przedrostek)
$=As(O)(OCH_3)$	metoksy(okso)-λ^5-arsanylideno (preferowany przedrostek)
=N(O)OH	hydroksy(okso)-λ^5-azanylideno (wstępnie wybrany przedrostek)
	aci-nitro



kwas 4-[hydroksy(okso)- λ^5-azanylideno]cykloheksano-1-karboksylowy (PIN)
kwas 4-*aci*-nitrocykloheksano-1-karboksylowy

-P=O	oksofosfanyl (wstępnie wybrany przedrostek)
-P(O)2	diokso- λ^5-fosfanyl (wstępnie wybrany przedrostek)
-Sb=O	oksostybanyl (wstępnie wybrany przedrostek)

P-67.1.4.1.2 Przedrostek ‘hydro’ w operacji powiązania może być dodany tylko w ogólnej nomenklaturze.
Przykłady:

>PH(O)	hydrofosforyl fosfonoil (wstępnie wybrany przedrostek)
>PH(S)	hydro(tiofosforyl) fosfonotioil (wstępnie wybrany przedrostek)

P-67.1.4.1.3 Podstawniki zespolone i kompleksowe

Jeśli grupa zawierająca atomy: B, N, P, As, Sb, łączy się poprzez atom tlenu, innego chalkogenu lub atom azotu ze związkiem, który zawiera inny podstawnik mający pierwszeństwo przed grupami zawierającymi B, N, P, As, Sb do wymieniania jako grupa główna, wówczas grupę zawierającą atomy: B, N, P, As, Sb nazywa się stosując przedrostek zespolony lub kompleksowy, zbudowany z przedrostków opisanych powyżej i ułożonych w porządku występowania poszczególnych składowych w związku.

Przykłady:

$(HO)_2P(O)\text{-}O\text{-}CH_2\text{-}COOH$

kwas 2-(fosfonooksy)octowy (PIN)

$(CH_3O)_2P(O)\text{-}S\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}COOH$

kwas 3-[(dimetoksyfosforylo)sulfanylo]propanowy (PIN)

$(HO)(HS)P(S)\text{-}NH\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}COOH$

kwas 3-{[hydroksy(sulfanylo)fosforotioilo]amino}propanowy (PIN)

P-67.1.4.2 Podstawniki pochodzące od kwasów borowych i kwasu krzemowego

Nazwy podstawników pochodzących od mononuklearnych kwasów boru i krzemu oraz ich analogów tworzy się przez podstawienie nazw macierzystych wodorków ‘boranu’ i ‘silanu’. Nazwa ‘borono’ dla $–B(OH)_2$ jest zachowana i jest wstępnie wybraną nazwą

Nazwa ‘boryl’ była stosowana do podstawnika H_2B-, natomiast obecnie zastąpiła ją wstępnie wybrana nazwa ‘boranyl’. Formy ‘boryl’ nie należy używać jako przedrostka dla grupy pochodzącej od kwasu borowego ($B(OH_3)$ powstałej w wyniku usunięcia wszystkich trzy grupy –OH.
Przykłady:

$-B(OH)_2$ borono (wstępnie wybrany przedrostek)	$-BH_2$ boranyl (wstępnie wybrany przedrostek) (nie borynoil)
>BH boranodiyl (wstępnie wybrany przedrostek) (nie: boronoil)	-B< boranotriyl (wstępnie wybrany przedrostek) (nie boryl)
=BH boranylideno (wstępnie wybrany przedrostek) (nie: boronoil)	≡B boranylidyno (wstępnie wybrany przedrostek) (nie boryl)

-$B(NH_2)_2$
diaminoboranyl (wstępnie wybrany przedrostek)
(nie borodiamidoil)

-$BH(O\text{-}CH_3)$
metoksyboranyl (preferowany przedrostek)
(nie hydrometoksyboryl)

-$Si(OH)_3$
trihydroksysilil
(wstępnie wybrany przedrostek)

-$Si(OH)_2(SH)$
dihydroksy(sulfanylo)silil
(wstępnie wybrany przedrostek)

-$SiCl_2(NH_2)$
aminodichlorosilil
(wstępnie wybrany przedrostek)

-$Si(O\text{-}CH_3)_3$
trimetoksy(silil)
(preferowany przedrostek)

P-67.1.4.3 Podstawniki pochodzące od kwasu azotowego i kwasu azotawego

Tworzenie nazw grup acylowych ‘nitro’ dla $–NO_2$ i ‘nitrozo’ dla –NO przyłączonych do pierwiastków C, P, As, Sb, Bi, Ge, Sn, Pb, B, Al, Ga, In i Tl omówiono w P-61.5. W tej części, opisane są reguły nazywania podstawników związanych z estrami, amidami i hydrazydami kwasu azotowego i kwasu azotawego.

P-67.1.4.3.1 Podstawniki pochodzące od estrów kwasu azotowego i kwasu azotawego

Azotany i azotyny jako estrów kwasu, odpowiednio, azotowego i azotawego omówiono w P-67.1.3.2. Podstawniki pochodzące od tych związków nazywa się w wyniku powiązania grup acylowych ‘nitro’ dla $-NO_2$ i ‘nitrozo’ dla –NO z przedrostkiem ‘oksy’ lub przez podstawienie tych grup acylowych do podstawników takich jak ‘sulfanyl’, selanyl’ lub ‘telluryl’.

Przykłady:

-$O\text{-}NO_2$

nitrooksy
(wstępnie wybrany przedrostek)

-O-NO

nitrozooksy
(wstępnie wybrany przedrostek)

-$S\text{-}NO_2$

nitrosulfanyl
(wstępnie wybrany przedrostek)

-Se-NO

nitrozoselanyl
(wstępnie wybrany przedrostek)

P-67.1.4.3.2 Podstawniki pochodzące od amidów kwasu azotowego i kwasu azotawego

Nazwą amidu kwasu azotowego, $O_2N\text{-}NH_2$, jest ‘nitroamid’ a podstawniki pochodzące od tego amidu utworzone w wyniku utraty jednego atomu wodoru nazywa się ‘nitroamido’ przez zastosowanie ogólnej reguły nazywania amidów (zob. P-66.1.1.4.2); to znaczy dodając literę „o” na końcu nazwy amidu. Nazwy innych pochodnych jak i pochodnych amidu kwasu azotawego, $ON\text{-}NH_2$, tworzy się w wyniku podstawienia grup acylowych, ‘nitro’ lub ‘nitrozo do odpowiednich podstawników: ‘amino’, ‘imino’ i ‘azanotriylo’. Należy podkreślić, że połączenia grup $–NO_2$ i –NO z innym atomem azotu nie należy traktować jako wydłużenie łańcucha.

Przykłady:

-NH-NO	$=N-NO_2$
nitrozoamino (wstępnie wybrany przedrostek)	nitroimino (wstępnie wybrany przedrostek)
$>N-NO_2$	$-NH-NO_2$
nitroazanodiylo (wstępnie wybrany przedrostek)	nitroamido (wstępnie wybrany przedrostek)

-N=S	sulfanylidenoamino (wstępnie wybrany przedrostek) tioksoamino tionitrozo
$-O_2S-N=S$	(sulfanylidenoamino)sulfonyl (wstępnie wybrany przedrostek) (tioksoamino)sulfonyl (tionitrozo)sulfonyl

P-67.1.4.3.3 Podstawniki utworzone z hydrazydów kwasu azotowego i kwasu azotawego

Podstawniki pochodzące od hydrazydu azotowego, $O_2N-NH-NH_2$ i azotawego, $ON-NH-NH_2$, nazywa się przez podstawienie grupy acylowej ‘nitro’ lub ‘nitrozo’ do odpowiedniego podstawnika, ‘hydrazyn-1-yl’, ‘hydrazyn-1-yliden’, itd.

Przykłady:

$O_2N-\overset{2}{N}H-\overset{1}{N}H-$	$ON-\overset{2}{N}H-\overset{1}{N}=$	$\overset{2}{H_2}N-\overset{1}{N}(NO_2)-$
2-nitrohydrazyn-1-yl (wstępnie wybrana nazwa)	nitrozohydrazynyliden (wstępnie wybrana nazwa)	1-nitrohydrazyn-1-yl (wstępnie wybrana nazwa)

P-67.1.4.4 Podstawniki pochodzące od kwasów chalkogenowych

P-67.1.4.4.1 Grupy acylowe

Nazwy grup acylowych pochodzących od kwasów chalkogenowych, jako podstawników, tworzy się za pomocą dwóch metod:

(1) metodologii opisanej w P-65.3.2.3, to jest opartej na stosowaniu wrostków określających zamianę funkcji przez atomy (grupy) :-S-, -Se-, -Te-, =NH i $=NNH_2$ i zastosowaniu powiązania dla innych atomów lub grup.

(2) ogólnej metody opisanej w P-65.2.1.5 dla grup acylowych utworzonych z pochodnych kwasu karbonowego i opisanej w P-67.1.4.1.1.4 dla grup acylowych wywodzących się z kwasów fosforowego, fosfonowego i fosfinowego oraz ich analogów arsenowych i antymonowych, którą stosuje się do kwasu sulfurowego i jego analogów zamiany funkcji.

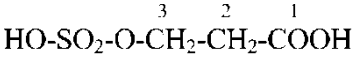
Wstępnie wybrane przedrostki tworzy się zgodnie z metodą (1).

Przykłady:

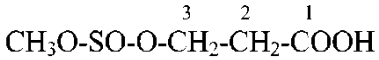
$-SO_2-$	sulfonyl (wstępnie wybrany przedrostek) sulfuryl
-S(O)(S)-	sulfonotioil (wstępnie wybrany przedrostek) sulfurotioil
$-S(S)_2-$	sulfonoditioil (wstępnie wybrany przedrostek) sulfuroditioil
-S(O)(=NH)-	sulfonoimidoil (wstępnie wybrany przedrostek) sulfuroimidoil
$-S(=NH)_2-$	sulfonodiimidoil (wstępnie wybrany przedrostek) sulfurodiimidoil
$-S(O)(=NNH_2)-$	sulfonohydrazonoil (wstępnie wybrany przedrostek) sulfurohydrazonoil
$-S(=NNH_2)$	sulfonodihydrazonoil (wstępnie wybrany przedrostek) sulfurodihydrazonoil
$-SO_2-Cl-$	chlorosulfonyl (wstępnie wybrany przedrostek) sulfurochlorydoil
$-SO_2-CN$	cyjanosulfonyl (preferowany przedrostek) sulfurocyjanidoil
$-SO_2-NCS$	izotiocyjanianosulfonyl (preferowany przedrostek) sulfuroizotiocyjanianidoil
-S(O)(S)-NCS	izotiocyjanianosulfonotioil (preferowany przedrostek) sulfuro(izotiocyjanianido)tioil
$-SO_2-O-CH_3$	metoksysulfonyl (preferowany przedrostek) metoksysulfuryl
-S(=O)-Cl	chlorosulfinyl (wstępnie wybrany przedrostek)

Metody (2) nie można stosować do kwasu sulfurawego, selenowego i selenawego, tellurowego i tellurawego, ze względu na możliwość tworzenia niejednoznacznych nazw.

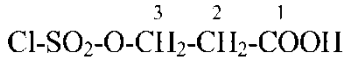
P-67.1.4.4.2 Jeśli grupa zawierająca siarkę jest dołączona poprzez atom tlenu (inny chalkogen) lub atom azotu do związku, który zawiera także inny podstawnik mający pierwszeństwo, przed grupą zawierającą siarkę, do wymieniania jako grupa główna, wówczas grupy zawierającą siarkę nazywa się z użyciem odpowiedniego przedrostka, utworzonego w wyniku operacji powiązania lub podstawienia (zob. P-35.4) jak opisano w rozdziałach P-65.3.2.2.2 i P-67.1.4.4.1.
Przykłady:



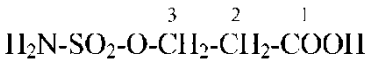
kwas 3-(sulfooksy)propanowy (PIN)



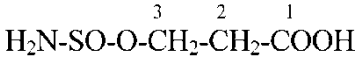
kwas 3-[(metoksysulfinylo)oksy]propanowy (PIN)



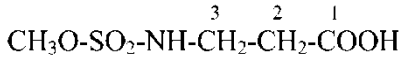
kwas 3-[(chlorosulfonylo)oksy]propanowy (PIN)
kwas 3-(sulfurochlorydoiloksy)propanowy



kwas 3-(sulfamoiloksy)propanowy
kwas 3-(sulfuramidoiloksy)propanowy
[nie kwas sulfonamidoiloksy)propanowy; nazwa kwas sulfonamidowy nie jest już uznawana]



kwas 3-[(aminosulfinylo)oksy]propanowy (PIN)
[nie kwas 3-(sulfinamidoiloksy)propanowy; nazwa kwas sulfinamidowy nie jest już uznawana]



kwas 3-[(metoksysulfonylo)amino]propanowy (PIN)

P-67.1.4.5 Podstawniki pochodzące od kwasów halogenowych

Nazwy przedrostków pochodzących z kwasów halogenowych i ich chalkogenowych analogów stosuje się jako obowiązujące przedrostki w nomenklaturze podstawnikowej. Są one wymienione w Tabeli 5.1 i omówione w P-61.3.2.3.

Przykłady:

OCl-	chlorozyl (wstępnie wybrany przedrostek)
S-Cl-	tiochlorozyl (wstępnie wybrany przedrostek)
O_2Cl-	chloryl (wstępnie wybrany przedrostek)
O_3Cl-	perchloryl (wstępnie wybrany przedrostek)

W analogiczny sposób nazywa się odpowiednie grupy Br, F i I.

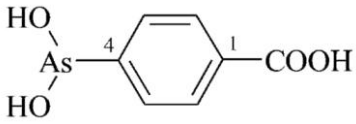
Przykład:

C_6H_5-BrO bromozylobenzen (PIN)

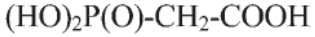
P-67.1.5 Porządek starszeństwa dla kwasów nieorganicznych i ich pochodnych

P-67.1.5.1 Jeśli obecna jest grupa charakterystyczna mająca starszeństwo w wymienianiu jako grupa główna (zob. porządek starszeństwa klas P-41 i kwasów P-42), wówczas kwas nieorganiczny wskazuje się przedrostkiem, o zachowanej nazwie lub nazwie utworzonej systematycznie (zob. P-67.1.4.1).

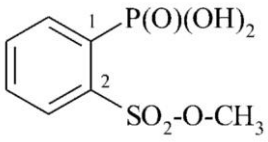
Przykłady:



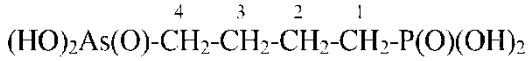
kwas 4-(dihydroksyarsanylo)benzoesowy (PIN)
[COOH starsza od $-As(OH)_2$]



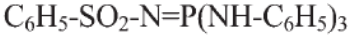
kwas fosfonooctowy (PIN)



kwas [2-(metoksysulfonylo)fenylo)]fosfonowy (PIN)
(kwas jest starszy od estru)



kwas (4-arsonobutylo)fosfonowy (PIN)
(kwas fosforowy jest starszy od kwasu arsenowego)



N-(trianilino-λ^5-fosfanylideno)benzenesulfonamid (PIN)

N-(trianilinofosforanylideno)benzenesulfonamide
(nie triamid *N*,*N′*,*N″*-trifenylo-*N‴*-benzenosulfonylofosforoimidowy;
ani tris(fenyloamid) *N‴*-benzenosulfonylofosforoimidowy)

P-67.1.5.2 Kiedy pochodne mononuklearnych kwasów nazywa się zgodnie z nomenklaturą klasowo-funkcyjną, starszeństwo ustalane jest według większej liczby atomów połączonych z atomem centralnym i pojawiających się najpierw na liście: O, OO, S, Se, Te dla kwasów, następnie F, Cl, Br, I, później pseudo halogenki w kolejności N_3, CN, NC, NCO, NCS, NCSe, NCTe, potem amidy i hydrazydy.

Przykłady:

$Br_2P(O)\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}P(O)Cl_2$

dichlorek (2-fosforodibromidoiloetylo)fosfonowy (PIN)
(Cl ma pierwszeństwo nad Br według reguł starszeństwa)

$Br_2P(O)\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}P(S)Cl_2$

dibromek (2-fosforodichloridotioiloetylo)fosfonowy (PIN)
(dibromek fosfonowy ma pierwszeństwo nad dichlorkiem fosfonotionowym; zakłada się, że O > S jest przed Cl > Br)

$Cl_2P(O)\text{-}O\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}O\text{-}P(O)Cl(NH_2)$

dichlorofosforan 2-(fosforoamidochloridoiloksy)etylowy (PIN)
(kwas dichlorofosforowy ma pierwszeństwo nad kwasem amidochlorofosforowym)

P-67.1.6 *aci*-Nitrozwiązki

aci-Nitrozwiązki wymagają osobnej wzmianki. Są one tautomerami nitrozwiązków o ogólnym wzorze R=N(O)OH lub $R_2N(O)OH$ i nazwa się je jako pochodne kwasu azynowego, $H_2N(O)OH$.

Przykład:

CH_2=N(O)-OH
kwas metylidenoazynowy (PIN)
aci-nitrometan

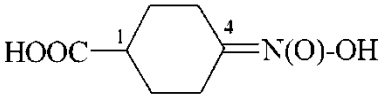
W razie potrzeby grupę $R_2N(O)$ określa się przedrostkiem pochodnym ‘azynoilo’, preferowanym względem ‘nitrorylo’ [patrz P-67.1.4.1(b)]. Grupa =N(O)OH nosi nazwę ‘hydroksy(okso)-λ^5-azanyliden’, natomiast przedrostek ‘*aci*-nitro’ można używać w ogólnej nomenklaturze.

Nazwa ‘hydroksy(okso)-λ^5-azanyliden’ jest zmianą w stosunku do roku 1993 (odn. 2), kiedy to zalecana była nazwa ‘hydroksynitroryl’ nie akceptowana w kontekście niniejszych wytycznych, gdzie dwie wolne walencyjności są wyrażone za pomocą przedrostka ‘yliden’ lub ‘diyl’.

Przykłady:

$(CH_3)_2N(O)\text{-}CH_2\text{-}CN$

N-oksyd cyjano-*N*,*N*-dimetylometanoaminy (PIN)
(dimetyloazynoilo)acetonitryl
[nie: (dimetylonitrorylo)acetonitryl



kwas 4-[hydroksy(okso)-λ^5-azanylideno]cykloheksano-1-karboksylowy (PIN)
kwas 4-*aci*-nitrocykloheksano-1-karboksylowy

P-67.2 DI-I POLINUKLEARNE KWASY NIEKARBONOWE

Tak samo jak kwasy mononuklearne, kwasy polinuklearne mają zachowane nazwy, które są wstępnie wybranymi nazwami. Nazwy podstawnikowe lub addytywne nie są zalecane. Zachowane nazwy są uznane za macierzyste i modyfikuje się je zamianą funkcji, w taki sam sposób, jak w przypadku kwasów mononuklearnych, tylko że w operacji zamiany funkcji stosuje się jedynie przedrostki.

Opisane są tutaj di- i polinuklearne niewęglowe kwasy tlenowe, gdzie atomami centralnymi są B, P, As, Sb, S i Se. Podzielone są one na trzy grupy. Dla kwasów di- i trinuklearnych, podane są przykłady dla każdego atomu centralnego. W niektórych przypadkach znane są wyższe kwasy polinuklearne. Ich nazwy tworzy się przez zastosowanie odpowiednich przedrostków wskazujących na liczbę atomów centralnych. Di- i polinuklearne niekarbonowe kwasy tlenowe są omawiane w Sekcji P-67.2 i P-67.3.

Ponieważ struktury kwasów arsenowych i antymonowych są podobne do kwasów fosforowych, ich nazwy tworzone są w ten sam sposób, gdzie w miejsce przedrostka ‘fosf’ wstawia się ‘ars’ i ‘styb’. Kwasy tellurowe określa się podobnie jak kwasy selenowe, zamieniając przedrostek ‘selen’ na ‘tellur’ w nazwie kwasu.

P-67.2.1 Wstępnie wybrane nazwy
P-67.2.2 Nomenklatura zamienna funkcji
P-67.2.3 Kwasy halogenowe i pseudohalogenowe
P-67.2.4 Amidy i hydrazydy
P-67.2.5 Estry i bezwodniki
P-67.2.6 Podstawniki wymieniane jako przedrostki

P-67.2.1 Wstępnie wybrane nazwy

Poniższe nazwy zwyczajowe zachowuje się jako wstępnie wybrane nazwy (dla spójności w nazwach polinuklearnych kwasów tlenowych, liczbowy wrostek ‘di’ jest stosowany przy tworzeniu nazw dinuklearnych ‘hypo’ kwasów. Chociaż ‘meta’ kwasy występują tylko w ogólnej nomenklaturze, to jeśli struktura jest nieznana są preferowanymi nazwami IUPAC.

> Dla spójności nazw polinuklearnych kwasów tlenowych, przedrostek liczbowy ‘di’ zawsze stosuje się przy tworzeniu nazw dinuklearnych ‘hypo’ kwasów, np. kwas hypodifosforawy, a nie kwas hypofosforawy.

$(HO)_2B\text{-}O\text{-}B(OH)_2$	kwas diborowy (wstępnie wybrana nazwa)
$(HO)_2B\text{-}B(OH)_2$	kwas hypodiborowy (wstępnie wybrana nazwa)
$(HO)_3Si\text{-}O\text{-}Si(OH)_3$	kwas dikrzemowy (wstępnie wybrana nazwa)
(HO)H(O)P-O-HP(O)(OH)	kwas difosfonowy (wstępnie wybrana nazwa)
(HO)(O)HP-HP(O)(OH)	kwas hypodifosfonowy (wstępnie wybrana nazwa)
(HO)PH-O-HP(OH)	kwas difosfonawy (wstępnie wybrana nazwa)
(HO)PH-HP(OH)	kwas hypodifosfonawy (wstępnie wybrana nazwa)

$(HO)_2(O)P\text{-}O\text{-}P(O)(OH)_2$	kwas difosforowy (wstępnie wybrana nazwa)
$(HO)_2(O)P\text{-}P(O)(OH)_2$	kwas hypodifosforowy (wstępnie wybrana nazwa)
$(HO)_2P\text{-}O\text{-}P(OH)_2$	kwas difosforawy (wstępnie wybrana nazwa)
$(HO)_2P\text{-}P(OH)_2$	kwas hypodifosforawy (wstępnie wybrana nazwa)
(HO)HAs(O)-O-HAs(O)(OH)	kwas diarsonowy (wstępnie wybrana nazwa)
(HO)(O)HAs-HAs(O)(OH)	kwas hypodiarsonowy (wstępnie wybrana nazwa)
(HO)AsH-O-HAs(OH)	kwas diarsonawy (wstępnie wybrana nazwa)
(HO)AsH-HAs(OH)	kwas hypodiarsonawy (wstępnie wybrana nazwa)
$(HO)_2(O)As\text{-}O\text{-}As(O)(OH)_2$	kwas diarsorowy (wstępnie wybrana nazwa) kwas diarsenowy
$(HO)_2(O)As\text{-}As(O)(OH)_2$	kwas hypodiarsorowy (wstępnie wybrana nazwa) kwas hypodiarsenowy
$(HO)_2As\text{-}O\text{-}As(OH)_2$	kwas diarsorawy (wstępnie wybrana nazwa) kwas diarsenawy
(HO)H(O)Sb-O-HSb(O)(OH)	kwas distybonowy (wstępnie wybrana nazwa)
(HO)(O)HSb-HSb(O)(OH)	kwas hypodistybonowy (wstępnie wybrana nazwa)
(HO)SbH-O-HSb(OH)	kwas distybonawy (wstępnie wybrana nazwa)
(HO)SbH-HSb(OH)	kwas hypodistybonawy (wstępnie wybrana nazwa)
$(HO)_2(O)Sb\text{-}O\text{-}Sb(O)(OH)_2$	kwas distiborowy (wstępnie wybrana nazwa)
$(HO)_2(O)Sb\text{-}Sb(O)(OH)_2$	kwas hypodistiborowy (wstępnie wybrana nazwa)
$(HO)_2Sb\text{-}O\text{-}Sb(OH)_2$	kwas distiborawy (wstępnie wybrana nazwa)
$(HO)_2Sb\text{-}Sb(OH)_2$	kwas hypodistiborawy (wstępnie wybrana nazwa)
$HO\text{-}SO_2\text{-}O\text{-}SO_2\text{-}OH$	kwas disiarkowy (wstępnie wybrana nazwa)
$HO\text{-}SO_2\text{-}SO_2\text{-}OH$	kwas ditionowy (wstępnie wybrana nazwa) kwas hypodisiarkowy
HO-SO-SO-OH	kwas ditionawy (wstępnie wybrana nazwa) kwas hypodisiarkawy

$[HAsO_3]_n$ = (-As(O)(OH)O-)$_n$	kwas metaarsorowy (tylko na użytek nomenklatury ogólnej) kwas metaarsenowy
$[HAsO_2]_n$ = (-As(OH)O-)$_n$	kwas metaarsorawy (tylko na użytek nomenklatury ogólnej) kwas metaarsenawy
$[HBO]_n$ = (-B(OH)O-)$_n$	kwas metaborowy (tylko na użytek nomenklatury ogólnej)
$[HPO_3]_n$ = (-P(O)(OH)O-)$_n$	kwas metafosforowy (tylko na użytek nomenklatury ogólnej)
$[HPO_2]_n$ = (-P(OH)O-)$_n$	kwas metafosforawy (tylko na użytek nomenklatury ogólnej)
$[H_2SiO_3]_n$ = (-Si(OH)$_2$O-)$_n$	kwas metakrzemowy (tylko na użytek nomenklatury ogólnej)
$[HSbO_3]_n$ = (-Sb(O)(OH)O-)$_n$	kwas metastyborowy (tylko na użytek nomenklatury ogólnej)
$[HSbO_2]_n$ = (-Sb(OH)O-)$_n$	kwas metastybonawy (tylko na użytek nomenklatury ogólnej)
(HO)HP(O)-O-HP(O)-O-HP(O)(OH)	kwas trifosfonowy (wstępnie wybrana nazwa)
(HO)$_2$P(O)-O-P(O)(OH)-O-P(O)(OH)$_2$	kwas trifosforowy (wstępnie wybrana nazwa)
HO-SO$_2$-O-SO$_2$-O-SO$_2$-OH	kwas trisiarkowy (wstępnie wybrana nazwa)

P-67.2.2 Pochodne zamiany funkcji di- i polinuklearnych tlenowych kwasów niewęglowych

P-67.2.2.1 Ogólna metodologia
P-67.2.2.2 Zamiana przez –OO-, -S-, =S, -Se-, =Se, -Te-, =Te, -NH- oraz =NH

P-67.2.2.1 Ogólna metodologia

Przedrostki stosuje się w celu wskazania zamiany funkcji w polinuklearnych tlenowych kwasach niewęglowych wymienionych w P-67.1.2.3.3 oraz P-67.1.2.3.4. Te przedrostki są podane wraz z numeracją w porządku alfabetycznym na początku zachowanej nazwy polikwasu, z dodatkiem, w miarę potrzeby właściwych lokantów. Numeracja każdego kwasu biegnie od jednego końca do drugiego, począwszy od i skończywszy na atomie centralnym. Przed zastosowaniem operacji zamiany funkcji, należy wybrać główną funkcję; otrzymuje ona niższy lokant. Kolejność funkcji, które należy uwzględnić to: kwasy (patrz P-67.2.2.2), halogenki kwasowe (patrz P-67.2.2.3) i pseudohalogenki (patrz P-67.2.2.4).

P-67.2.2.2 Zamiana przez –OO-, -S-, =S, -Se-, =Se, -Te-, =Te, -NH- oraz =NH

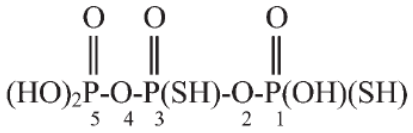
Zamianę funkcji atomu(ów) tlenu wskazuje się przedrostkami, to jest peroksy dla –OO-, tio dla -S- oraz =S, seleno dla -Se- oraz =Se, telluro dla -Te- i =Te oraz imido dla -NH- i =NH. Lokanty literowe pisane kursywą z cyframi w indeksie górnym N^1 N^2 stosuje się w celu zaznaczenia podstawienia grup imidowych, które nie są łącznikami pomiędzy atomami, którym, jako części łańcucha, nadano liczbowe lokanty. Reguły primowania opisano w P-16.9.

Stosowanie lokantów w indeksie górnym ‘*N’* stanowi modyfikację w porównaniu z poprzednimi zaleceniami seryjnego primowania liter, np. *N′*, *N″* itd.; seryjne primowania następowało po arabskiej numeracji, a liczba primów opowiadała rosnącej wartości liczb arabskich

Litery pisane kursywą z indeksem górnym używa się do właściwego ulokowania chalkogenowych atomów w grupach kwasowych, np. S^3.

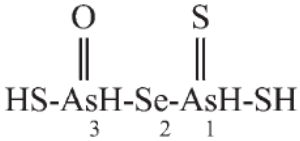
Stanowi to modyfikację w odniesieniu do poprzednich zaleceń, w których pozycja atomów chalkogenów w grupach kwasowych opisana była szeregiem liczb arabskich poprzedzających symbol atomu.

Przykłady:

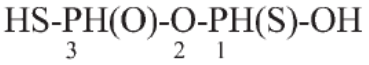


S^1,S^3-kwas 1,3-ditiotrifosforowy
(nie: 1-*S*,3-*S*-kwas 1,3-ditiotrifosforowy)
(nazwa pochodzi od wstępnie wybranej nazwy kwas trifosforowy)

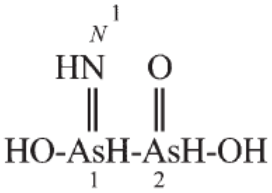
S^1-kwas 1-tiodifosforowy (nazwa pochodzi od wstępnie wybranej nazwy kwas trifosforowy, ‘tio’ wymusza lokant ‘1’)



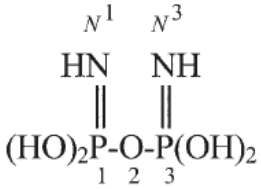
S^1,S^3-kwas 2-seleno-1,1,3-tritiodiarsonowy (nazwa pochodzi od wstępnie wybranej nazwy kwas diarsonowy, zamiana ‘ditio’ w jednej grupie kwasowej wymusza lokant ‘1’)



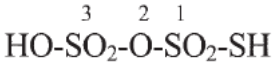
O[1],*S*[2]-kwas 1,3-ditiofosfonowy (nazwa pochodzi od wstępnie wybranej nazwy kwas difosfonowy; grupa ‘OH’ funkcji kwasowej ma pierwszeństwo do niższego lokantu przed grupą ‘SH’ zgodnie z kolejnością alfabetyczną)



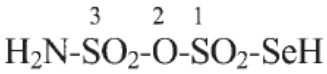
kwas 1-imidohypodiarsonowy (nazwa pochodzi od wstępnie wybranej nazwy kwas hypodiarsonowy, przedrostek zamiany ‘imido’ wymusza lokant ‘1’)



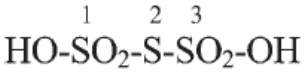
kwas 1,3-diimidodifosforowy (nazwa pochodzi od wstępnie wybranej nazwy kwas difosforowy)



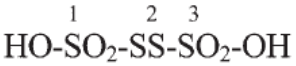
S[1]-kwas 1-tiodisiarkowy
(nazwa pochodzi od wstępnie wybranej nazwy kwas disiarkowy)



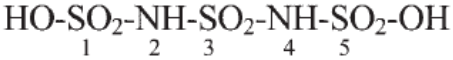
Se[1]-kwas 3-amido-1-selenodisiarkowy (nazwa pochodzi od wstępnie wybranej nazwy kwas disiarkowy; kwas wymusza lokant ‘1’)



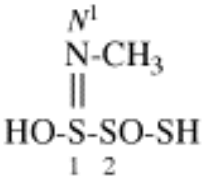
kwas 2-tiodisiarkowy
(wstępnie wybrana nazwa)
kwas sulfanodisulfonowy
kwas tritionowy (nazwa zwyczajowa)



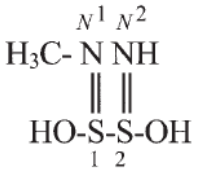
kwas 2-(ditioperoksy)disiarkowy
(wstępnie wybrana nazwa)
kwas disulfanodisulfonowy
kwas tetrationowy (nazwa zwyczajowa)



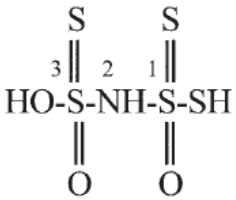
kwas 2,4-diimidotrisiarkowy (nazwa pochodzi od wstępnie wybranej nazwy kwas trisiarkowy)



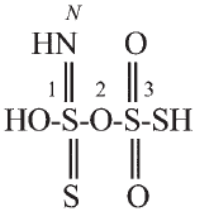
S^2-kwas N^1-metylo-1-imido-2-tioditionawy
(PIN; zamiana ‘imido’ wymusza lokant ‘1’)
(nie: 2-*S*-kwas 1-(metyloimido)-2-tioditionawy)



kwas N^1-metylo-1,2-diimidoditionawy (PIN)



O^3,S^1-kwas 2-imido-1,1,3-tritiodisiarkowy
(nazwa pochodząca od wstępnie wybranej nazwy kwas disiarkowy)



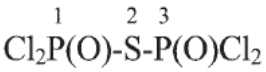
O^1,S^3-kwas 1-imido-1,3-ditiodisiarkowy (nazwa pochodząca od wstępnie wybranej nazwy kwas disiarkowy; grupa ‘OH’ funkcji kwasowej ma pierwszeństwo do niższego lokantu, zgodnie z pierwszeństwem alfabetycznym nad grupą ‘SH’)

P-67.2.3 Halogenki i pseudohalogenki kwasowe di- i polinuklearnych tlenowych kwasów niewęglowych

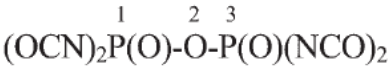
Halogenki i pseudohalogenki kwasowe, w których wszystkie grupy OH zastąpione zostały atomami lub grupami halogenkowymi lub pseudohalogenkowymi, nazywa się nomenklaturą klasowo-funkcyjną zamieniając nazwę ‘kwas’ na nazwę odpowiedniego halogenku lub pseudohalogenku. Dla halogenków i pseudohalogenkow kwasowych pierwszeństwo mają halogenki (alfabetycznie), a następnie halogenidy w następującym porządku: N_3, CN, NC, NCO, NCS, NCSe, NCTe.

Przykłady:

1-bromek-3-chlorek 2-imidodifosfonowy (nazwa pochodząca od wstępnie wybranej nazwy kwas difosfonowy; ‘Br’, bromek ma pierwszeństwo przed ‘Cl’ chlorkiem (alfabetycznie) i wymusza lokant ‘1’)

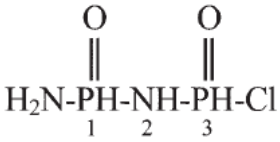


tetrachlorek 2-tiodifosforowy (nazwa pochodząca od wstępnie wybranej nazwy kwas difosforowy)



tetraizocyjanian difosforowy (PIN)

trijodek cyjanohypodifosforawy

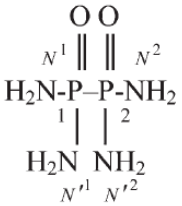


chlorek 1-amido-2-imidodifosfonowy (nazwa pochodząca od wstępnie wybranej nazwy kwas difosfonowy, chlorek kwasowy ma pierwszeństwo nad grupą amidową i wymusza lokant ‘1’)

P-67.2.4 Amidy i hydrazydy di- i polinuklearnych tlenowych kwasów niewęglowych

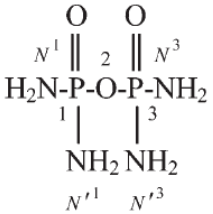
Polinuklearne tlenowe kwasy niewęglowe, w których wszystkie grupy -OH zastąpione zostały grupami $–NH_2$ lub $-NHNH_2$ nazywa się nomenklaturą klasowo-funkcyjną odpowiednio amidami lub hydrazydami. Amidy wskazuje się nazwą klasową ‘amid’ poprzedzoną przedrostkiem zwielokrotniającym ‘di’, ‘tri’, itd. W podobny sposób, hydrazydy, określa się nazwą klasową ‘hydrazyd’. Zamianę funkcji wskazuje się przedrostkiem wymienianym przed całą nazwą, a nie przed nazwa klasy. Lokanty literowe pisane kursywą *N*, *N′* itd. oraz lokanty literowe z cyframi w indeksie górnym N^1, N^1 itd. stosuje się do oznaczenia podstawienia atomów azotu, które nie są łącznikami pomiędzy atomami centralnymi, otrzymującymi liczbowe lokanty jako część łańcucha. Jeśli wybór jest konieczny, amidy mają pierwszeństwo przed hydrazydami i otrzymują niższę lokanty.

Przykłady:



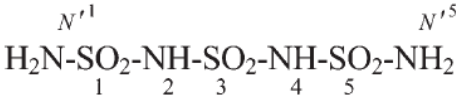
tetraamid hypodifosforowy (nazwa pochodzi od wstępnie wybranej nazwy kwas hypodifosforowy)

diamid hypodifosfonowy (nazwa pochodzi od wstępnie wybranej nazwy kwas hypodifosfonowy

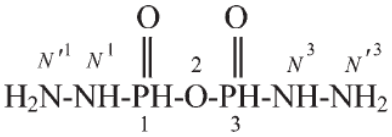


tetraamid difosforowy (nazwa pochodzi od

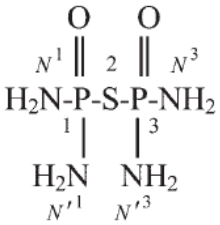
wstępnie wybranej nazwy kwas difosforowy)



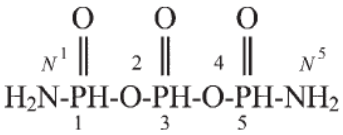
diamid 2,4-diimidotrisiarkowy (nazwa pochodzi od wstępnie wybranej nazwy kwas trisiarkowy)



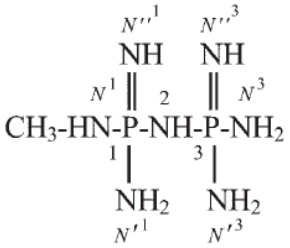
dihydrazyd difosfonowy (nazwa pochodzi od wstępnie wybranej nazwy kwas difosfonowy)



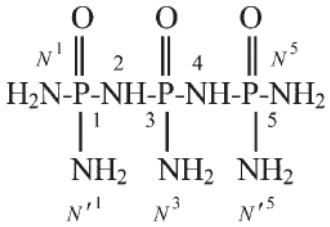
tetraamid 2-tiodifosforowy (nazwa pochodzi od wstępnie wybranej nazwy kwas difosforowy)



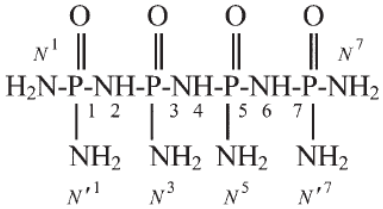
diamid trifosfonowy (nazwa pochodząca od wstępnie wybranej nazwy kwas trifosfonowy)



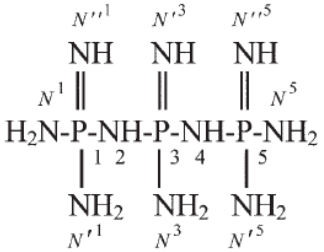
tetraamid N^1metylo-1,2,3-triimidodifosforowy (PIN)



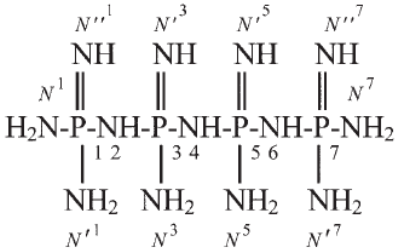
pentaamid 2,4-diimidotrifosforowy (nazwa pochodząca od nazwy wybranej nazwy kwas trifosforowy)



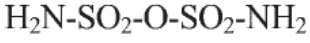
heksaamid 2,4,6-triimidotetrafosforowy (nazwa pochodząca od wstępnie wybranej nazwy kwas tetrafosforowy)



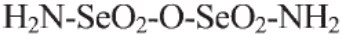
pentaamid pentaimidotrifosforowy (nazwa pochodząca od wstępnie wybranej nazwy kwas trifosforowy)



heksaamid heptaimidotetrafosforowy (nazwa pochodząca od wstępnie wybranej nazwy kwas tetrafosforowy)

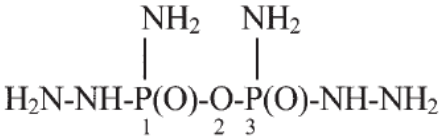


diamid disiarkowy (nazwa pochodząca od wstępnie wybranej nazwy kwas disiarkowy)



diamid diselenowy (nazwa pochodząca od wstępnie wybranej nazwy kwas diselenowy)

1-amid 3-hydrazydodifosfonowy



1,3-diamid 1,3-dihydrazydodifosforowy

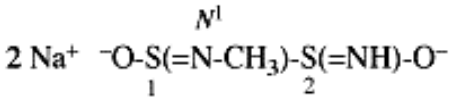
P-67.2.5 Sole, estry i anhydrydy tlenowych di- i polinuklearnych kwasów niewęglowych

P-67.2.5.1 Sole
P-67.2.5.2 Estry
P-67.2.5.3 Anhydrydy

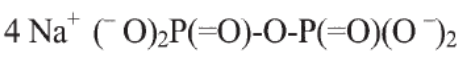
P-67.2.5.1 Sole tlenowych di- i polinuklearnych kwasów niewęglowych

P-67.2.5.1.1 Obojętne sole tlenowych di- i polinuklearnych kwasów niewęglowych nazywa się wymieniając nazwę anionu(ów) a za nią, jako osobne słowo(a) nazwę kationu(ów). Nazwy anionów tworzy się zmieniając w nazwie kwasu końcówkę ‘owy’ na ‘an’ (lub ‘ian’) oraz ‘awy’ na ‘yn’ (lub ‘in’) i pomijając słowo’kwas’. Jeżeli występuje kilka kationów, wymienia się je w porządku alfabetycznym.

Przykłady:



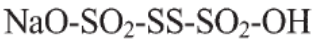
N[1]-metylo-1,2-diimidoditionian disodu (PIN)



difosforan tetrasodu (nazwa pochodząca od wstępnie wybranej nazwy kwas difosforowy)

P-67.2.5.1.2 Kwaśne sole tlenowych di- i polinuklearnych kwasów niewęglowych nazywa się w taki sam sposób jak sole obojętne, natomiast obecne kwasowe atomy wodoru wskazuje się słowem ‘wodór’ (lub diwodór, itd.) umieszczonym pomiędzy nazwą anionu i kationu jako osobne słowo.

Przykład:

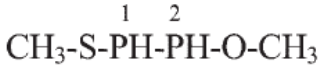


2-ditioperoksydisiarczan wodoru sodu (nazwa pochodząca od wstępnie wybranej nazwy kwas disiarkowy)

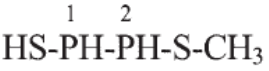
P-67.2.5.2 Estry tlenowych polinuklearnych kwasów niewęglowych

W pełni zestryfikowane polinuklearne tlenowe kwasy niewęglowe nazywa się w podobny sposób jak obojętne sole, z tym, że nazwy dopuszczalnych grup (grupy alkilowe, grupy arylowe itd.) zastępują nazwy kationów i jeśli jest ich więcej niż jedna to wymienia się je w kolejności alfabetycznej. Nie w pełni zestryfikowane wielozasadowe tlenowe kwasy niewęglowe oraz ich sole nazywane są w taki sam sposób jak obojętne estry i kwaśne sole, ale nazwa ‘wodór’ wskazująca na kwasowe atomy wodoru wskazana jest osobnym słowem ‘wodór’ (z odpowiednim przedrostkiem zwielokrotniającym) wstawionym pomiędzy nazwę anionu i nazwę kationu lub grupy organicznej, .

Przykłady:

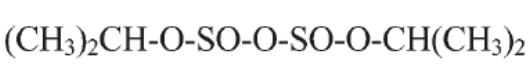


tiohypodifosfonin dimetylu (PIN)



ditiohypodifosfonin wodoru metylu (PIN)

tiodisiarczan *S*-etylu *O*-metylu (PIN)



disiarczyn di(propan-2-ylu) (PIN)

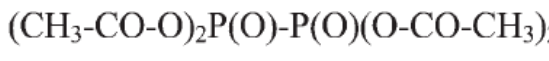
tiodisiarczan O^1,O^3-dimetylu

P-67.2.5.3 Anhydrydy

Obojętne anhydrydy utworzone z kwasu organicznego i polinuklearnego tlenowego kwasu niewęglowego mającego wstępnie wybraną nazwę, nazywa się podając w kolejności alfabetycznej nazwy kwasów poprzedzone nazwą klasy ‘anhydryd’; przedrostki zwielokrotniające ‘di’, ‘tri’, itd. stosuje się do wskazania liczby połączeń anhydro.

Anhydrydy kwasowe nazywa się wybierając starszy kwas jako związek macierzysty lub stosując systematyczną nomenklaturę podstawnikową opisaną w P-67.3.1.

Przykłady:



tetraanhydryd tetraoctowo-hypodifosforowy (PIN)

dianhydryd octowo-ditionawo-propionowy (PIN)
dianhydryd octowo-hypodisiarkawo-propanowy

P-67.2.6 Podstawniki pochodzące od polikwasów

W obecności grup charakterystycznych mających pierwszeństwo wymieniania jako grupy główne, polinuklearne tlenowe kwasy niewęglowe wymienia się jako przedrostki. Nazwy tych przedrostków tworzy się:

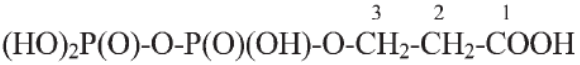
(1) przez kombinacje grup acylowych

(2) na podstawie nazw grup zawierających największą liczbę centralnych atomów P, As, Sb, S, Se i T

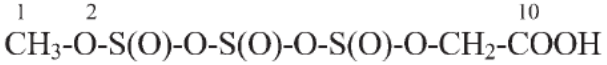
(3) za pomocą nomenklatury zamiennej szkieletu (patrz P-15.3 i P-51.3), jeśli warunki do jej stosowania są spełnione.

Jeśli istnieje możliwość wyboru macierzystego podstawnika, pierwszeństwo przysługuje podstawnikowi macierzystemu o większych rozmiarach, a następnie, jeśli jest taka potrzeba,według kolejności alfanumerycznej.

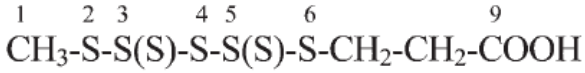
Przykłady:



(2) kwas 3-[(1,3,3-trihydroksy-1,3-diokso-1λ^5,3λ^5-difosfoksan-1-ylo)oksy]propanowy (PIN)
(1) kwas 3-{[hydroksy(fosfonooksy)fosforylo]oksy}propanowy



(3) kwas 3,5,7-triokso-2,4,6,8-tetraoksa-3λ^4,5λ^4,7λ^4-tritiadekan-10-owy (PIN)
(1) kwas [({[(metoksysulfinylo)oksy]sulfinylo}oksy)sulfinylo]oksy}octowy
(2) kwas [(5-metoksy-1,3,5-triokso-1λ^4,3λ^4,5λ^4-trisulfoksan-1-ylo)oksy]octowy



(3)kwas 3,5-disulfanylideno-2,3λ^4,4,5λ^4,6-pentatianonan-9-owy (PIN)
(2) kwas 3-(5-metylo-2,4-sulfanylideno-2λ^4,4λ^4-pentasulfanylo)propanowy
(1) kwas [({[(metylosulfanylo)sulfinotioilo]sulfanylo}sulfinotioilo)sulfanylo]propanowy

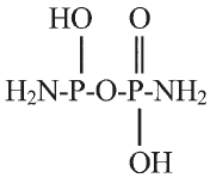
P-67.3 NAZWY PODSTAWNIKOWE I NAZWY KLASOWO- FUNKCYJNE POLIKWASÓW

P-67.3.1 Nazwy polinuklearnych tlenowych kwasów niewęglowych, których nie można utworzyć na bazie podstawowych oksokwasów nazywa się albo z zastosowaniem nazw klas, takich jak anhydryty, lub tworzy się je podstawnikowo. Anhydrydy najczęściej nazywa się z zastosowaniem metody podstawnikowej.

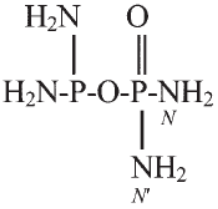
Niektóre nazwy są również uwzględnione w tej sekcji, ponieważ ich struktura nie odpowiada nazwie wymuszanej nazwą dikwasu lub hypodikwasu, na przykład podana poniżej nazwa ‘kwas disiarkawy’.

Nazwy pochodnych kwasów, które nie mogą być utworzone bezpośrednio przez wymianę funkcji, tworzy się przez podstawienie kwasu o preferowanej nazwie takiej jak kwas fosfonowy lub kwas fosfinowy albo przyjmują nazwę klasy taką jak ‘anhydryd’. Związek macierzysty jest wybierany zgodnie z regułami pierwszeństwa klas: kwasy, halogenki kwasowe, azydki, amidy, hydrazydy, cyjanki, izocyjanki, izocyjaniany (analogi tlenowców w porządku O > S > Se > Te), imidy, azydki i największą liczbę grup reprezentującą klasy mające pierwszeństwo.

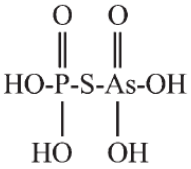
Przykłady:



kwas {[amino(hydroksy)fosfanylo]oksy}fosfonamidowy (nazwa wstępnie wybrana)
(kwas fosfonoamidowy ma pierwszeństwo przed kwasem fosfonoamidawym)
monoanhydryd fosforoamidowo-fosforamidawy
(kwas ma pierwszeństwo przed anhydrydem w regułach pierwszeństwa klas)



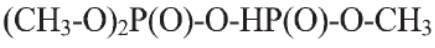
anhydryd fosforodiamidowo-fosforodiamidawy (nazwa wstępnie wybrana)
diamid [(diamidofosfanylo)oksy]fosfonowy
(anhydryd ma pierwszeństwo przed amidem)



kwas (arsonosulfanylo)fosfonowy (nazwa wstępnie wybrana)
tiomonoanhydryd arsorowo-fosforowy (kwas ma pierwszeństwo przed bezwodnikiem; kwas fosforowy ma pierwszeństwo przed kwasem arsorowym)

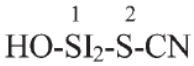
kwas *N*-(hydroksyfosfonoilo)fosforoamidowy (nazwa wstępnie wybrana)
(jedyną możliwą nazwą jest nazwa podstawnikowa)

kwas (dihydroksyfosfanylo)fosfinowy (nazwa wstępnie wybrana)

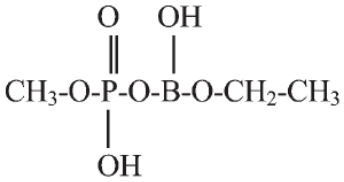


[(dimetoksyfosforylo)oksy]fosfonian metylu (PIN)
(kwas fosfonowy ma pierwszeństwo przed kwasem fosforowym; patrz P-42)
(dawniej izohypofosforan trimetylu)

kwas bis(trimetylofosfanylo)fosfinowy (PIN)
(nie: 1,1,3,3-tetrametylotrifosfan-2-ol; kwas ma pierwszeństwo przed ‘heterolem’)



1-hydroksy-1,1-dijodo-1λ^4-disulfano-2-karbonitryl (PIN)
(dawniej: kwas dijodo(tiocyjanianido)ortosiarkawy)
(nie: kwas ortosulfurodijodotiocyjanawy)



{[etoksy(hydroksy)boranylo]oksy}fosfonian wodoru metylu (PIN)
anhydryd (boran diwodoru etylu)-(fosforan diwodoru metylu)

CH_3-CO-O-P(O)$(OH)_2$	kwas (acetyloksy)fosfonowy (PIN) monoanhydryd fosforowo-octowy fosforan monoacetylowy
HO-SeO_2-O-SO_2-OH	bezwodnik selenowo-siarkowy (nazwa wstępnie wybrana) (selenonooksy)hydroksy-λ^6-sulfanodion
CH_3-CH_2-CO-O-B$(OH)_2$	kwas (propanoiloksy)boronowy (PIN) monoanhydryd borowo-propanowy
CH_3-CO-O-CO-O-CO-OH	kwas {[(acetyloksy)karbonylo]oksy}mrówkowy (PIN) monoanhydryd dikarbonowy octowy

P-67.3.2 Problemy związane z nazwą kwasu disiarkawego

Nazwa kwas disiarkawy powinna odpowiadać strukturze HO-SO-O-SO-OH, tak rozumianej dla wszystkich homogenicznych dikwasów zgodnie z definicją podaną w P-67.2. Ponieważ struktura HO-SO-SO_2-OH, w *Nomenclature of Inorganic Chemistry* (odn. 12), nazwana została kwasem disiarkawym, inna nazwa musi zostać przypisana związkowi HO-SO-O-SO-OH. W tej sytuacji właściwe jest zastosowanie nazwy podstawnikowej.

Ponieważ nazwa ‘kwas disiarkawy’ została, w *Nomenclature of Inorganic Chemistry* (odn. 12), przypisana do HO-SO-SO_2-OH, nie może ona być stosowana w sposób

systematyczny do HO-SO-O-SO-OH. Stąd, preferowaną nazwą IUPAC dla tego ostatniego związku jest '1,3-dihydroksy-1λ^4,3λ^4-ditioksano-1,3-dion'.

Przykłady:

HO-SO-O-SO-OH

1,3-dihydroksy-1λ^4,3λ^4-ditioksano-1,3-dion (nazwa wstępnie wybrana)

CH_3-O-SO-O-SO-O-CH_3

1,3-dimetoksy-1λ^4,3λ^4-ditioksano-1,3-dion (PIN)

CH_3-O-S(=NH)-O-S(=NH)-O-CH_3

1,3- dimetoksy-1λ^4,3λ^4-ditioksano-1,3-diimina (PIN)

P-68 NOMENKLATURA ZWIĄZKÓW ORGANICZNYCH PIERWIASTKÓW GRUP: 13, 14, 15, 16 I 17 NIE WŁĄCZONYCH DO ROZDZIAŁÓW OD P-62 DO P-67

P-68.0 Wstęp
P-68.1 Nomenklatura związków pierwiastków grupy 13
P-68.2 Nomenklatura związków pierwiastków grupy 14
P-68.3 Nomenklatura związków pierwiastków grupy 15
P-68.4 Nomenklatura związków pierwiastków grupy 16
P-68.5 Nomenklatura związków pierwiastków grupy 17

P-68.0 WSTĘP

Nomenklatura związków organicznych opiera się na dwóch metodach. Ogólne zasady, reguły i konwencje stosowane, z kilkoma rzadkimi wyjątkami, do pierwiastków z grup od 13 do 17, zostały opisane i objaśnione w poprzednich rozdziałach. Druga metoda opiera się na identycznym traktowaniu związków w ramach jednej grupy. Jak dotąd, nomenklatura związków pierwiastków grupy 13 dotyczy związków boru; w przyszłej publikacji uwzględnione zostaną inne. Wygodnym jest opisywanie wszystkich związków należących do danej grupy wedle tej samej reguły, aby zaznaczyć wszelkie podobieństwa i ewentualne różnice. Ta metoda ułatwia tworzenie nazw nowych związków przez porównanie ich struktury z ustalonymi modelami.

Innym aspektem nomenklatury opisywanej grupa po grupie, jest możliwość łatwego uchwycenia ogólnych wzorców dla różnych grup. Nomenklatura grupy 15 jest różnorodna; przyrostki związane są z azotem, mononuklearne i polinuklearne kwasy są podstawą nazw wielu pochodnych związków fosforu i arsenu, a wiele związków antymonu i bizmutu nazywa się nomenklaturą podstawnikową. Dla porównania, związki grupy 14 są z zasady nazywane nomenklaturą podstawnikową. A zatem związek C_6H_5-PH-OCH_3 nazywany nomenklaturą klasowo-funkcyjną jest estrem, tzn. fenylofosfinianem metylu, natomiast związek C_6H_5-SnH-$(OCH_3)_2$ nazywany nomenklaturą podstawnikową jest dimetoksy(fenylo)stannanem pomimo wyraźnego podobieństwa strukturalnego.

Jest także trzeci cel napisania tego rozdziału, dotyczącego grup od 13 do 17. W tym rozdziale nomenklatura podstawnikowa traktuje metale, półmetale i niemetale w ten sam sposób kiedy związek zawiera węgiel. Grupowe traktowanie tłumaczy wiele aspektów nomenklatury związków

metaloorganicznych. To szczególnie widoczne jest w przypadku nomenklatury związków grupy 13 i 14, dla których obszerna i dobrze znana nomenklatura związków boru i węgla służy jako model do nazywania innych związków obu grup.

Dla związków boru i metali grup 14 i 15, tj. Ge, Sn, Pb, Sb i Bi, stosuje się te same reguły, co w innych rozdziałach niniejszych zaleceń, a mianowicie, jeżeli związek zawiera węgiel i może być nazwany według zasad nomenklatury podstawnikowej, podanych w innych miejscach tych zaleceń, opartych na przyjętych nazwach macierzystego wodorku, wówczas nazwa staje się PIN. Natomiast, jeżeli związek nie zawiera węgla, wówczas nazwa jest określana jako wstępnie wybrany macierzysty wodorek lub nazwą opartą na wstępnie wybranym macierzystym wodorku lub związku. Poza tymi przypadkami, wiele związków tych pierwiastków nie jest strukturalnie zgodna z zasadami nomenklatury podstawnikowej, wówczas nazwy tworzone są wedle zasad nomenklatury nieorganicznych i koordynacyjnej; patrz odnośnik 12.

P-68.1 NOMENKLATURA ZWIĄZKÓW ZAWIERAJĄCYCH PIERWIASTKI GRUPY 13

Z wyjątkiem polinuklearnych borowodorków, związki boru są tradycyjnie włączane do zaleceń nazywania związków organicznych. Jednakże nomenklatura podstawnikowa w oparciu o macierzyste wodorki, ich podstawniki i odpowiednie operacje była stosowane aby uzupełniać nomenklaturę polinuklearnych związków boru. Np. nazwy utworzone według nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu, nomenklatury multiplikacyjnej i nazwy pochodzące od funkcyjnych macierzystych kwasów opartych na kwasie borowym $B(OH)_3$, kwasie boronowym $HB(OH)_2$ i kwasie borynowym $H_2B(OH)$; są one zachowanymi funkcyjnymi związkami macierzystymi.

Nomenklatura związków Al, Ga, In i Tl włącznie ze związkami formalnie metaloorganicznymi jest, według niniejszych zaleceń oparte na nomenklaturze związków boru i jest zalecana wyłącznie w ogólnej nomenklaturze. Zalecenia dotyczące preferowanych nazw IUPAC większości związków tych pierwiastków ukażą się w późniejszej publikacji sygnowanej przez inny zespół.

P-68.1.1 Macierzyste wodorki
P-68.1.2 Nazwy podstawników pochodzących od macierzystych wodorków
P-68.1.3 Modyfikacja stopnia uwodornienia
P-68.1.4 Funkcyjne związki macierzyste
P-68.1.5 Nomenklatura podstawnikowa
P-68.1.6 Addukty

P-68.1.1 Macierzyste wodorki

P-68.1.1.1 Mononuklearne wodorki
P-68.1.1.2 Acykliczne polinuklearne wodorki
P-68.1.1.3 Cykliczne wodorki

P-68.1.1.1 Mononuklearne wodorki

Nazwy mononuklearnych wodorków są wymienione w Tabeli 2. Standardowa wiązalność wynosi 3 i do wskazania niestandardowej wiązalności stosuje się konwencję λ (patrz P-14.1). Nazwy tych macierzystych wodorków są nazwami wstępnie wybranymi.

Przykłady:

BH_3 BH

boran (nazwa wstępnie wybrana)

λ^1-boran (nazwa wstępnie wybrana)

AlH_3
aluman (nazwa wstępnie wybrana)

GaH_3
galan (nazwa wstępnie wybrana)

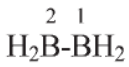
InH_3
indygan (nazwa wstępnie wybrana)

TlH_3
talan (nazwa wstępnie wybrana)

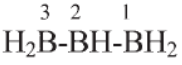
P-68.1.1.2 Acykliczne wodorki polinuklearne

P-68.1.1.2.1 Nazwy acyklicznych macierzystych wodorków di- i polinuklearnych tworzy się podając liczbę atomów w szkielecie cząsteczki przedrostkiem zwielokrotniającym ‘di’, ‘tri’ itd. przed nazwą mononuklearnego wodorku macierzystego. Liczba atomów wodoru w cząsteczce określona jest cyfrą arabską podaną w nawiasie bezpośrednio po nazwie utorzonej jak opisano powyżej. Te liczby są pomijane w przypadku, gdy nie ma dwuznaczności lub konwencjonalnie w nazwach acyklicznych polinuklearnych wodorków. Specjalna nomenklatura jest stosowana do nazywania policyklicznych poliboranów; te nazwy opisane są w rozdziale IR-6.2.3 odnośnika 12. Macierzyste wodorki są nazwami wstępnie wybranymi.

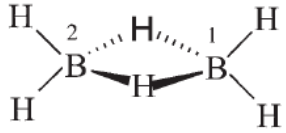
Przykłady:



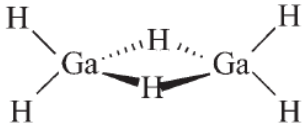
diboran(4) (nazwa wstępnie wybrana)



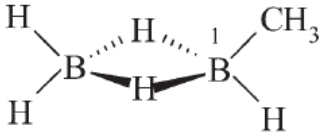
triboran(5) (nazwa wstępnie wybrana)



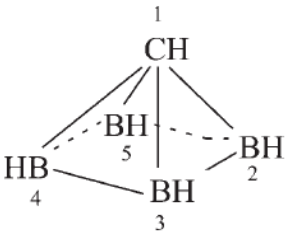
diboran(6) (nazwa wstępnie wybrana)



digalan(6) (nazwa wstępnie wybrana)



1-metylodiboran(6) (PIN)

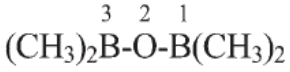


1-karba-*nido*-pentaboran(5) (PIN)

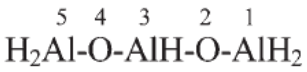
P-68.1.1.2.2 Związki utworzone z naprzemienych heteroatomów nazywa się zgodnie z P-21.2.3.1. Są one traktowane jako niefunkcyjne macierzyste struktury o nazwach wstępnie wybranych, z wyjątkiem występowania w strukturze atomów azotu – wówczas takie związki nazywa się jako aminy (patrz P-62.2).

W przypadku związków zawierających atomy azotu, mamy do czynienia ze zmianą w stosunku do Przewodnika z roku 1993 (odn. 2), ponieważ charakterystyczna grupa ‘amina’ nie była tam uznawana.

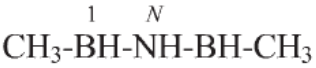
Przykłady:



tetrametylodiboroksan (PIN)

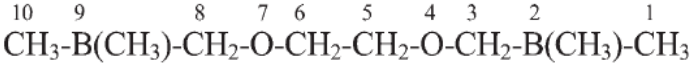


trialuminoksan (nazwa wybrana)

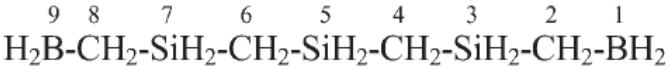


1-metylo-*N*-(metyloboranylo)boranoamina (PIN)

P-68.1.1.2.3 Związki nazywane za pomocą nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu
Przykłady:



2,9-dimetylo-4,7-dioksa-2,9-diboradekan (PIN)
[etano-1,2-diylobis(oksymetyleno)]bis(dimetyloboran)

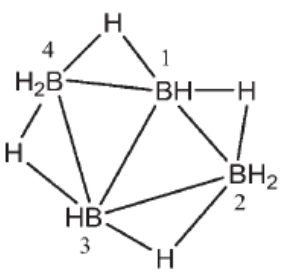


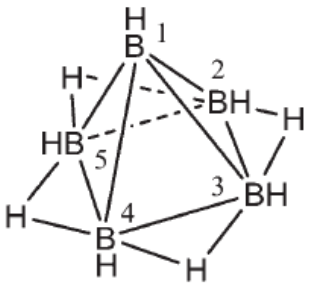
3,5,7-trisila-1,9-diboranonan (PIN)
[silanodiylobis(metyleno)]bis[(boranylometylo)silan]
Si,*Si*′-bis(boranylometylo)[silanodiylobis(metyleno)]bis(silan)

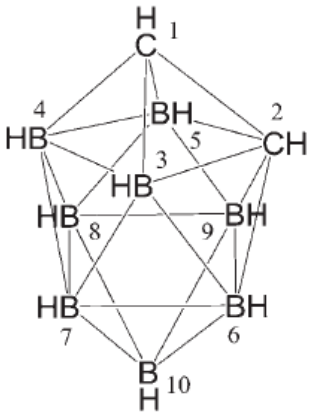
P-68.1.1.3 Cykliczne wodorki macierzyste

P-68.1.1.3.1 Wielościenne poliborany. Nomenklatura wielościennych poliboranów obejmuje bogaty i różnorodny system charakteryzujący się specjalnymi przedrostkami. Był on opisany i objaśniony w sekcji IR-6.2.3 (odn. 12) i nie jest powtarzany w niniejszych zaleceniach.

Przykłady:



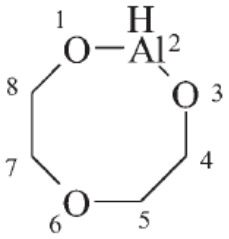




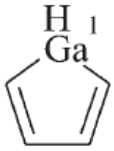
:

arachno-tetraboran(10) (nazwa wstępnie wybrana)	*nido*-pentaboran(9) (nazwa wstępnie wybrana)	1,2-dikarba-*closo*-dekaboran(10) (PIN)

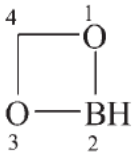
P-68.1.1.3.2 Heterocykliczne macierzyste wodorki zawierające atomy z grupy 13 należą do wszystkich klas i układów pierścieni opisanych w Rozdziale P-2. Preferowane przez IUPAC nazwy są wybrane na podstawie ogólnych reguł nazewnictwa podanych dla poszczególnych klas.
Przykłady:



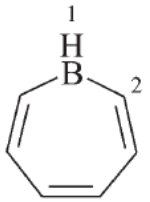
1,3,6,2-trioksaluminokan
(nie 1,3,6-trioksa-2-aluminacyklooktan)



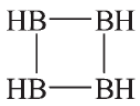
1*H*-galol
(nie 1-galacyklopenta-2,4-dien)



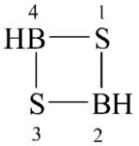
1,3,2-dioksaboretan (PIN)
(nie 1,3-dioksa-2-boracyklobutan)



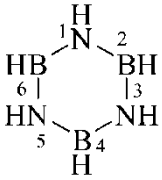
1*H*-borepin (PIN)
(nie 1*H*-1-boracyklohepta-2,4,6-trien)



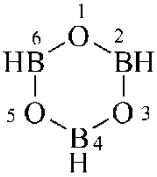
tetraboretan (nazwa wstępnie wybrana; patrz P-12.2; P-22.2.5)
cyklotetraboran(4)
(nie 1,2,3,4-tetraboracyklobutan)



1,3,2,4-ditiadiboretan (wstępnie wybrana nazwa; patrz P-12.2; P-22.2.6)
(nie 1,3-ditia-2,4-diboracyklobutan)

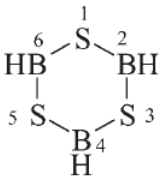


1,3,5,2,4,6-triazatriborynan (wstępnie wybrana nazwa)
borazyn
cyklotriborazan
(nie 1,3,5-triaza-2,4,6-triboracykloheksan)



1,3,5,2,4,6-trioksaborinan (wstępnie wybrana nazwa)
boroksyn
cyklotriboroksan

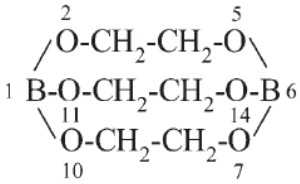
(nie 1,3,5-trioksa-2,4,6-cyklotriboroksan)



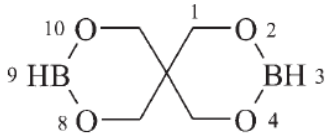
1,3,5,2,4,6-tritiatriborinan
(nazwa wstępnie wybrana)
bortiin
cykloboratian
(nie 1,3,5-tritia-2,4,6-triboracykloheksan)

P-68.1.1.3.2.2 Związki von Baeyra i związki spiro (patrz też P-23 i P-24)

Przyklady:



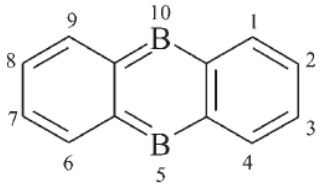
2,5,7,10,11,14-heksaoksa-1,6-diborabicyklo[4.4.4]tetradekan (PIN)



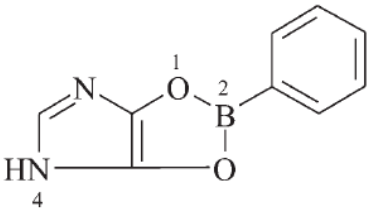
2,4,8,10-tetraoksa-3,9-diboraspiro[5.5]undekan

P-68.1.1.3.3 Układy pierścieni skondensowanych

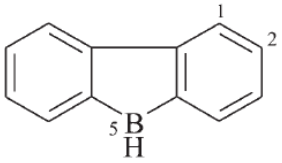
Przykłady:



borantren (PIN)



2-fenylo-2*H*,4*H*-[1,3,2]dioksaborolo[4,5-*d*]imidazol (PIN)



5*H*-dibenzo[*b*,*d*]borol

P-68.1.2 Nazwy podstawników wywodzących się z macierzystych wodorków

Nazwy podstawników $–BH_2$ i =BH pochodzących od boranu tworzy się postępując według metody (2) opisanej w P-29.2; są one wstępnie wybranymi przedrostkami.

Przedrostki pochodzące od boranu nie są już nazywane metodą (1) z P-29.2

Przykłady:

$–BH_2$

boranyl
(wstępnie wybrany przedrostek)
(nie boryl)

=BH

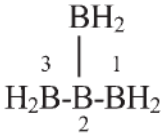
boranylideno
(wstępnie wybrany przedrostek)
(nie borylideno)

>BH

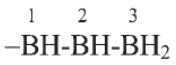
–B–

boranodiyl
(wstępnie wybrany przedrostek)
(nie borylen)
(nie boryliden)

boranotriyl
(wstępnie wybrany przedrostek)
(nie borylidyn)



2-boranylotriboran(5)
(wstępnie wybrany przedrostek)



triboran(5)-1-yl
(wstępnie wybrany przedrostek)

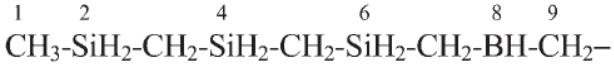
$–BH–O–BH_2$

diboroksanylo
(wstępnie wybrany przedrostek)

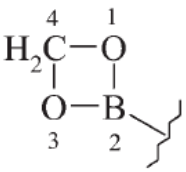
$–BH–NH–BH_2$

(boranyloamino)boranyl
(wstępnie wybrany przedrostek)
(nie diborazan-1-yl)

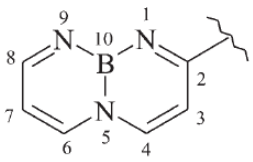
$H_2Al–$ alumanyl
$H_2In–$ indyganyl
$H_2Ga–$ galanyl
$H_2Ta–$ talanyl



2,4,6-trisila-8-boranonan-9-yl (wstępnie wybrany przedrostek)



1,3,2-dioksaboretan-2-yl



[1,3,2]diazaborino[1,2-*a*][1,3,2]diazaborin-2-yl

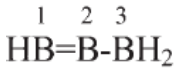
(preferowany przedrostek) (preferowany przedrostek)

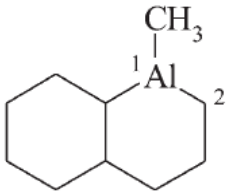
P-68.1.3 Modyfikacja stopnia uwodornienia

Podwójne wiązanie wskazuje się końcówką ‘en’ albo przedrostkami ‘hydro’ z nazwami układów pierścieniowych ‘mancude’, tak jak opisano w P-31.1 i P-31.2.

Przedrostki hydro i dehydro są obecnie klasyfikowane jako przedrostki rozłączne, ale nie są włączone alfabetycznego spisu rozłącznych przedrostków (patrz P-14.4 oraz P-15.1.5.2, P-31.2, P-58.2).

Przykłady:





triboren(5)
(nazwa wstępnie wybrana) 1-metylodekahydro-1-benzoaluminin

P-68.1.4 Funkcyjne związki macierzyste

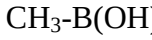
P-68.1.4.1 Nazwy kwas borowy, kwas boronowy i kwas borynowy są wstępnie wybranymi zachownymi nazwami związków, odpowiednio, $B(OH)_3$, $HB(OH)_2$ i $H_2B(OH)$ (patrz P-67.1.1). Są one preferowanymi nazwami IUPAC do tworzenia nazw odpowiednich soli, estrów lub bezwodników, lub związków, w których atom(y) wodoru związany(e) z atomem boru jest (są) podstawiony(e); np. kwas metyloboronowy CH_3-$B(OH)_2$. Chalkogenowe analogi nazywa się z użyciem wrostków określających funkcyjną zamianę atomu tlenu na S, Se, i Te.

Nazwy kwasów, takie jak powyższe, nie są stosowane do innych pierwiastków grupy 13, które nazwa się nomenklaturą podstawnikową opierającą się na odpowiednim macierzystym wodorku. Nazwy takie jak kwas metanoboronowy czy metyloboronowy dla CH_3-$B(OH)_2$ są omówione w P-67.1.1.2.

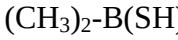
Przykłady:

metyloboronian disodu (PIN)

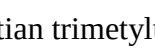
metyloboronian wodoru sodu (PIN)



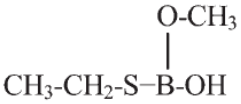
kwas metyloboronowy (PIN)
(nie metyloboranodiol)



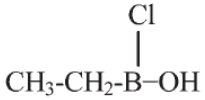
kwas dimetyloborynotiowy (PIN)
kwas dimetylo(tioborynowy)
(nie dimetyloboranotiol)



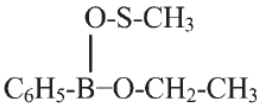
borotritian trimetylu (PIN)
tritioboran trimetylu



borotian wodoru *S*-etylu *O*-metylu (PIN)
boran wodoru *S*-etylu *O*-metylu

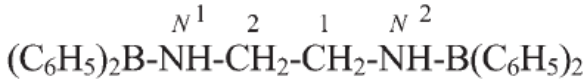


kwas etyloboronochlorydowy (PIN)
kwas etylochloroboronowy; chlor zastępuje grupę OH kwasu boronowego
kwas chloro(etylo)borynowy (podstawniki chlorowy i etylowy zastępują atomy H kwasu borynowego



fenyloborono(tioperoksan) *O*-etylu-*OS*-metylu (PIN)
fenylo(tioperoksy)boronian *O*-etylu-*OS*-metylu

dimetyloalumanolan sodu



N[1],*N*[2]-bis(difenyloboranylo)etano-1,2-diamina (PIN)
[nie *N*,*N*′-(etano-1,2-diylo)bis(amid difenyloborynowy);
nie *N*,*N*′-(etano-1,2-diylo)bis(difenyloboranoamina);
nie 1,1,6,6-tetrafenylo-2,5-diaza-1,6-diboraheksan]

P-68.1.4.2 Podstawniki kwasów boronowych

Ogólna metodologia tworzenia nazw podstawników pochodzących od kwasów boronowych została opisana w P-67.1.4.2. Za wyjątkiem nazwy ‘borono’ dla $(HO)_2B–$, która jest zachowana, ich nazwy tworzy się podstawnikowo w oparciu o macierzysty wodorek ‘boran’, BH_3. Chalkogenowe analogi ‘borono’ nazywa się z użyciem przedrostków zamiennych, a nie wrostków.

Przykłady:

$(HO)_2B–$
borono
(wstępnie wybrany przedrostek)
dihydroksyboranylo

$(HS)BH–$

sulfanyloboranyl
(wstępnie wybrany przedrostek)

$(HO)(HS)B–$

tioborono
(wstępnie wybrany przedrostek)
hydroksy(sulfanylo)boranyl

$(HSe)_2B–$

diselenoborono
(wstępnie wybrany przedrostek)
bis(selanylo)boranyl

$Cl–BH–$

chloroboranyl

$(H_2N)_2B–$

diaminoboranyl

(wstępnie wybrany przedrostek)
(nie chloroboryl)

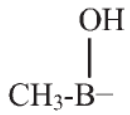
(wstępnie wybrany przedrostek)

$(CH_3)_2B–O–$

$CH_3–BH–NH$

(dimetyloboranylo)oksy
(preferowany przedrostek)

(metyloboranylo)amino
(preferowany przedrostek)



hydroksy(metylo)boranyl
(preferowany przedrostek)

P-68.1.5 Nomenklatura podstawnikowa

Pochodne boranu, BH_3, nazywa się nomenklaturą podstawnikową; podstawniki wskazuje się przyrostkami i przedrostkami zgodnie z zasadami, regułami i konwencjami nomenklatury podstawnikowej. Trzy kwasy opisane w P-68.1.4 mają zachowane nazwy, które są wstępnie wybranymi nazwami.

Pochodne nazywa się zgodnie ze starszeństwem klas według ogólnej reguły opisanej w P-41. Stąd kwasy mające zachowane nazwy, mają pierwszeństwo przed przyrostkami. Przyrostki są używane, kiedy jest to zalecane w nomenklaturze podstawnikowej, zgodnie z ogólną regułą opisaną w P-43. Wobec braku przyrostka, który miałby pierwszeństwo w nazywaniu związków organicznych, jeśli możliwy jest wybór macierzystego wodorku, porządek starszeństwa jest jak następuje: N > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > I > Al > Ga > In > Tl > O > S > Se > Te > C (podstawniki)

P-68.1.5.1 Nomenklatura z użyciem przyrostka
P-68.1.5.2 Nomenklatura z użyciem przedrostka

P-68.1.5.1 Nomenklatura z użyciem przyrostka

Przyrostki, jeśli są dostępne, używa się do wskazania grupy charakterystycznej; przedrostki nie są zalecane. Przyrostki zawierające atom węgla tworzą preferowane nazwy IUPAC.

Przykłady:

$H_2B–CN$

boranokarbonitryl (PIN)

$(HO)_2B–B(OH)_2$

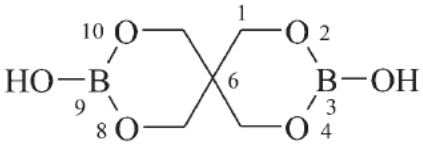
kwas hypodiborowy
(wstępnie wybrana nazwa, patrz P-67.2.1)
diborano(4)tetraol
(nie tetrahydroksydiboran(4))

$(CH_3)_2Tl–OH$

dimetylotalanol
hydroksydimetylotalan

$(CH_3)_2Tl–O^- Na^+$

dimetylotalanolan sodu



2,4.8.10-tetraoksa-3,9-diboraspiro[5.5]undekano-3,9-diol (PIN)

P-68.1.5.2 Nomenklatura z użyciem przedrostka

P-68.1.5.2.1 Podstawione macierzyste wodorki
P-68.1.5.2.2 Związki z atomami lub grupami mostkującymi
P-68.1.5.2.3 Związki z grupami o wyższym starszeństwa

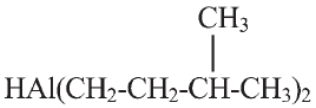
P-68.1.5.2.1 Podstawione macierzyste wodorki

Normalne nazwy przedrostków używane do wskazywania podstawników macierzystych wodorków B, Al, In oraz Tl.

Przykłady:

trimetyloboran (PIN)

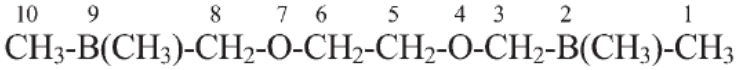
trietyloaluman



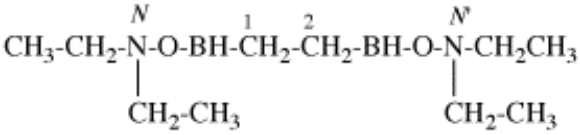
bis(3-metylobutylo)aluman

tributoksyaluman

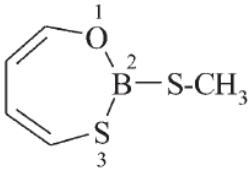
N,*N*′-bis(butyloboranylo)boranodiamina (PIN)
(nie 1,5-dibutylotriborazan)



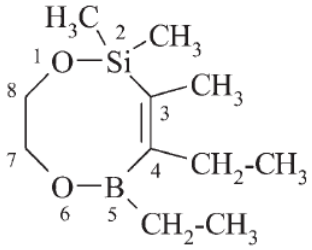
2,9-dimetylo-4,7-dioksa-2,9-diboradekan (PIN)
[etano-1,2-diylobis(oksymetyleno)]bis(dimetyloboran)



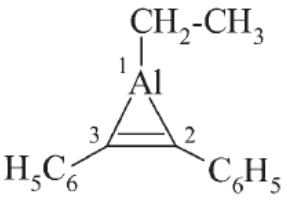
N,*N*′-[etano-1,2-diylobis(boranodiyloksy)]bis(*N*-etyloetano-1-amina) (PIN)
O,*O*-[etano-1,2-diylobis(boranodiylo)]bis(*N*,*N*-dietylohydroksyloamina)



2-(metylosulfanylo)-2*H*-1,3,2-oksatiaborepin (PIN)



4,5-dietylo-2,2,3-trimetylo-2,5,7,8-tetrahydro-1,6,2,5-dioksasilaborocyn (PIN)



1-etylo-2,3-difenylo-1*H*-aluminiren

P-68.1.5.2.2 Związki z atomami lub grupami mostkującymi

Pochodne di- i poliheteranów zawierających pierwiastki grupy 13, takie jak diboran, poliborany i pokrewne kongenery Al, Ga, In i Tl nazywa się z zastosowaniem nomenklatury podstawnikowej.

Kiedy niemostkowy atom wodoru jest podstawiony, lokanty, włącznie z lokantem ‘1’ używa się w zwyczajowy sposób. Mostkowe atomy i grupy wskazuje się w następujący sposób:

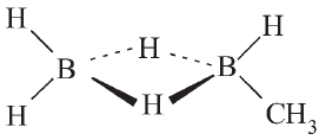
(a) podstawnik mostkujący oznacza się grecką literą μ (mi) bezpośrednio przed nazwą podstawnika i nazwę przedrostka oddziela się myślnikiem od pozostałej części nazwy;

(b) dwa lub więcej mostkujących podstawników tego samego rodzaju wskazuje się za pomocą ‘di-μ’ lub ‘bis-μ’ itd.

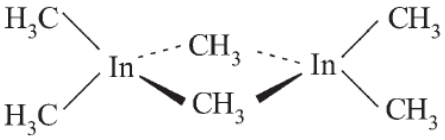
(c) podstawniki mostkujące wymienia się z innymi podstawnikami w kolejności alfanumerycznej;

Jeżeli ten sam podstawnik jest jednocześnie grupą mostkującą i niemostkującym podstawnikiem, wymieniany jest najpierw jako podstawnik mostkujący.

Przykłady:



1-metylodiboran(6) (PIN)



di-μ-metylo-tetrametylodiindygan(6)

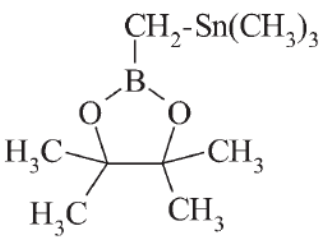
di-μ-jodo-1-jodo-1,2,2-tris(prop-2-en-1-ylo)diindygan(6)

Aby zapoznać się z innymi przykładami zastosowania symbolu ‘μ’, patrz reguła IR-9.2.5.2 i IR-10.2.3.1, w odn. 12.

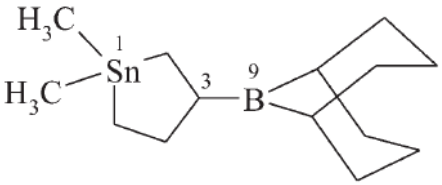
P-68.1.5.2.3 Związki z grupami o wyższym starszeństwie

Jeśli obecne są grupy o wyższym starszeństwie, macierzyste struktury i przedrostki wskazuje się zgodnie ze starszeństwem klas (patrz P-41).

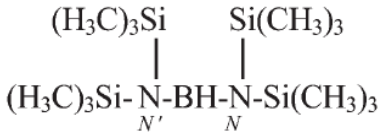
Przykłady:



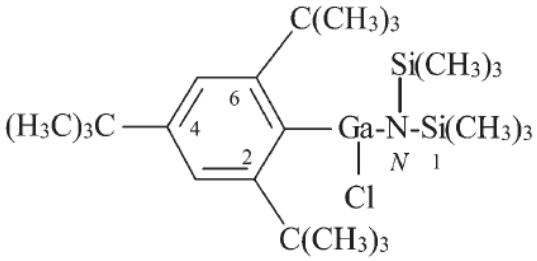
trimetylo[(4,4,5,5-tetrametylo-1,3,2-dioksaborolan-2-ylo)metylo]stannan (PIN)
(Sn jest starsze od B)



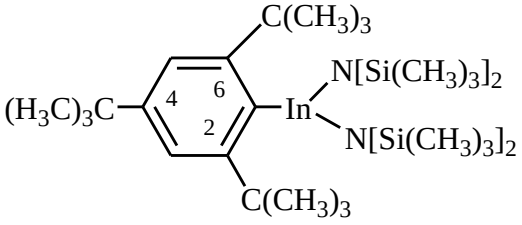
3-(9-borabicyklo[3.3.1]nonan-9-ylo)-1,1-dimetylostannolan (PIN)



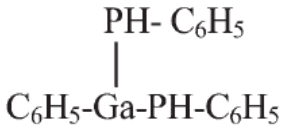
N,*N*,*N*′,*N*′-tetrakis(trimetylosililo)boranodiamina (PIN)
[nie *N*,*N*′-boranodiylobis[1,1,1-trimetylo-*N*-(trimetylosililo)silanoamina]; diamina ma pierwszeństwo przed monoaminą nawet jeśli ‘Si’ ma pierwszeństwo przed ‘B’ (patrz P-44.1.1)



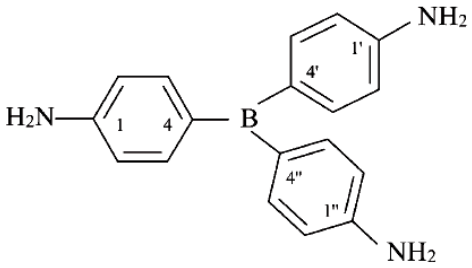
N-[chloro(2,4,6-tri-*tert*-butylofenylo)galanylo]-1,1,1-trimetylo-*N*-(trimetylosylilo)silanoamina
(Si jest starszy od Ga)



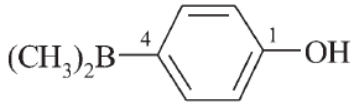
N,*N*,*N*′,*N*′-tetrakis(trimetylosililo)-1-[(2,4,6-tri-*tert*-butylofenylo)indyganodiamina {nie *N*,*N*’-[(2,4,6-tri-*tert*-butylofenylo)indyganodiylo]bis[1,1,1-trimetylo-N-(trimetylosililo)silanoamina]; diamina ma pierwszeństwo przed monoaminą nawet jeśli Si jest starszy od In (patrz P-44.1.1)



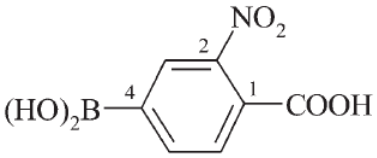
(fenylogalanodiylo)bis(fenylofosfan)
(P jest starszy od Ga)



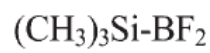
4,4′,4′′-boranotriylotrianilina (PIN; nazwa multiplikacyjna)
4,4′,4′′-boranotriylotris(benzeno-1-amina)



4-(dimetyloboranylo)fenol (PIN)



kwas 4-borono-2-nitrobenzoesowy



(difluoroboranylo)trimetylosilan (PIN)
(Si ma pierwszeństwo przed B
[nie difluorek (trimetylosylilo)boronowy;
patrz P-67.1.2.5.2]

tris(etylodisulfanylo)galan
tris[etylo(ditioperoksy)]galan

tri(oktadekanian) alumanotriylu
(pseudoester)

P-68.1.6 Addukty (patrz także P-14.8)

Addukt jest nowym rodzajem chemicznym (AB), którego każde indywiduum molekularne powstaje przez bezpośrednie połączenie (addycję) dwóch oddzielnych indywiduów molekularnych (A) i (B) w taki sposób, że mogą być zmiany w łączalności , ale nie może być zmiany w liczbie atomów w obu idywiduach molegularnych (patrz odn. 18). ‘Addukt’ jest terminem ogólnym, który głównie używa się w odniesieniu do produktów addycji i który, w miarę możności należy stosować zamiast mniej wyraźnego terminu ‘kompleks’. Możliwa jest stechiometria inna niż 1:1, np. 2:1, wówczas produkt określa się mianem ‘bis-addukt’. Addukt wewnątrzcząsteczkowy tworzy się, kiedy (A) i (B) są grupami stanowiącymi części tego samego indywiduum molekularnego.

W niniejszej części, opisane są addukty Lewisa zawierające związki boru, w oparciu o ogólne zasady nomenklatury adduktów organicznych, wyłożone w P-14.8. Składnik będący kwasem Lewisa

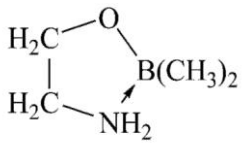
jest zazwyczaj organicznym związkiem boru, akceptor pary elektronów; składnik będący zasadą Lewisa jest zazwyczaj, ale nie zawsze, organicznym związkiem azotu.

Dla adduktów złożonych wyłącznie ze związków organicznych, poszczególne składniki są podawane zgodnie z regułami starszeństwa klas (patrz P-41). Zalecenia zawarte w regule D-1.55, odn. 1 z roku 1979 oraz w zmienionych Zaleceniach Nomenklatury Chemii Nieorganicznej z roku 2005 nie są już w mocy i obecnie nie bierze się już pod uwagę liczby składników w addukcie, ani też kolejności alfanumerycznej.

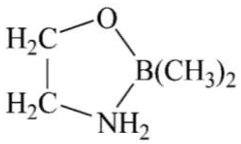
P-68.1.6.1 Struktury ‘adduktów’ Lewis'a

Takie addukty mogą być oddzielnymi rodzajami, które są wymieszane na poziomie molekularnym, lub mogą łączyć się ze sobą w sposób nieokreślony. W takim przypadku, we wzorze, składniki są ze sobą związane z użyciem w centrum kropki . Gdy więź jest określona, poszczególne składniki można pokazać na trzy różne sposoby. Każda z nich ma konotację do rodzaju użytej nomenklatury.

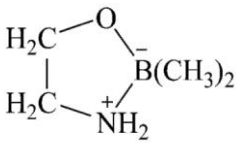
Jedną z fundamentalnych zasad w nomenklaturze związków organicznych jest nazywanie związku dokładnie tak jak został przedstawiony we wzorze, bez ustalania konfiguracji elektronowej, w której może się on znajdować. Dlatego musimy być przygotowani do nazwania każdej z przedstawionych struktur, które mogą być narysowane.



(I)



(II)



(III)

Struktura **(I)** przedstawia połączenie dwóch składników z wykorzystaniem wiązania zaznaczonego strzałką, zdefiniowanego w donośniku 23: ‘Wiązanie koordynacyjne tworzy się w wyniku interakcji pomiędzy idywiduami molekularnymi, z których jedna jest donorem, a druga akceptorem pary elektronów uwspólnionej w powstającym kompleksie, np. wiązanie N→B w cząsteczce $H_3N→BH_3$. Mimo analogii wiązań datywnych i kowalencyjnych, wynikającej z dzielenia wspólnej pary elektronów pomiędzy dwoma wicynalnymi atomami, wiązanie datywne odróżnia się znaczną polarnością, mniejszą siłą oraz większą długością. Charakterystyczną cechą wiązania datywnego jest, że jego minimalna eneria zerwanie w fazie gazowej, lub obojętnym rozpuszczalniku przebiega na drodze heterolitycznego rozpadu wiązania.’ W innym miejscu dyskusji pozycji ‘koordynacja’ w odn. 23 wskazano na to, że termin "koordynacja" jest przestarzały, a pochodzenie elektronów wiążących samo w sobie nie ma wpływu na charakter utworzonego wiązania. Niemniej, użycie strzałki zdecydowanie sugeruje, że poszczególne składniki mogą być traktowane jako oddzielne struktury, a ten sposób zapisu jest najczęściej wykorzystywany do tworzenia nazw adduktów zgodnie z zasadami nomenklatury związków organicznych. Stąd, w niniejszym opracowaniu ta struktura służy do przedstawiania adduktów Lewis'a.

Struktura **(II)** przedstawia połączenie z użyciem wiązania kowalencyjnego obecnie faworyzowanego w opisie wiązania zawierającego dwa elektrony niezależnie od ich pochodzenia (odn. 18). Taki zapis wzywa do użycia nomenklatury zgodnej z zasadami koordynacji. Struktury takie będą wykorzystywane w tym opracowaniu do tworzenia koordynacyjnych nazw, tam gdzie są podane, nawet jeżeli odpowiednie struktury nie zostaną przedstawione. Nazwanie związku mającego

takie ściśle kowalencyjne wiązanie z użyciem zasad nomenklatury związków organicznych wymaga zastosowania konwencji λ dla atomów zaangażowanych w łączenie, co nie jest faworyzowne przez ułamkową wiązalność.

Struktura (**III**) jest formalnym zapisem struktury (**II**) pokazującą ładunki formalne na atomach zaangażowanych w tworzenie wiązania, co będzie wymagane do zastosowania zasad nomenklatury związków organicznych do nazwania tej struktury.

Zasady nomenklatury związków organicznych wymagałyby zwitterjonowej nazwy (patrz P-74), której na ogół unika się w nomenklaturze organicznej. W tym podrozdziale nazwy zwitterjonowe nie są w ogóle używane.

We wzorach adduktów Lewis'a, zasady Lewis'a, które na ogół z natury są związkami organicznymi, podawane są w pierwszej kolejności według porządku starszeństwa klas związków organicznych, pierścienie i układy pierścieni, łańcuchy jak przedstawiono w rozdziale P-4, a następnie związki nieorganiczne to znaczy związki nie zawierające atomów węgla, w porządku rosnącej liczby, a w przypadku występowania w równej ilości, w porządku alfabetycznym zgodnie z pierwszym symbolem we wzorze. Kwasy Lewis'a wymienia się następnie w tej samej kolejności. Związki zawierające cząsteczki wody są wyjątkiem, woda jest zawsze wymieniana na końcu.

P-68.1.6.1.1 Ogólne organiczne metody nazywania adduktów Lewis'a

Addukty (związki addycyjne) pomiędzy obojętnymi zasadami Lewis'a a kwasami Lewis'a nazywa się przez podanie nazwy każdego ze składników w kolejności zapisanej we wzorze i łącząc nazwy obu składników za pomocą długiej kreski (zob. P-16.2.5), lub podając zestaw połączonych symboli atomów rozdzielonych długą kreską, umieszczony w nawiasie. Liczbę cząsteczek każdego ze składników zapisuje się dwiema metodami:

(1) za pomocą odpowiednich przedrostków zwielokrotniających, za wyjątkiem mono;

(2) przez wskazanie proporcji rodzajów, jeśli to konieczne, po pełnej nazwie cyframi arabskimi rozdzielonymi znakiem / i umieszczonymi w nawiasach z odstępem przed pierwszym nawiasem; wodę jeśli występujące wymienia się na końcu nazwy a liczbę cząsteczek wody na jednostkę wzoru zapisuje się jako ostatnią pomiędzy cyframi w nawiasach.

W razie potrzeby, szczególnie gdy może być więcej niż jeden możliwy donorowy lub akceptorowy atom, połączenie wskazuje się pisanymi kursywą symbolami atomów połączonych długą kreską (patrz P-16.2.5), umieszczonymi w nawiasach i wymienianych pomiędzy nazwami obu składników adduktu. Każdy symbol atomu odnosi się do najbliższego do niego składnika. Nazwy składników oraz symbole atomów zapisuje się w kolejności donor-akceptor, natomiast lokant składnika (jeśli występuje) podaje się przed odpowiednim symbolem atomu.

Jednakże te ‘nazwy adduktów’ nie są PIN-ami; są one nazwami koordycyjnymi i ‘nieorganicznymi’ (patrz odn. 12). Tak więc w tym dokumencie tym adduktom PIN-y nie są przypisane. Będzie to zrobione w następnym opracowaniu dotyczącym PIN-ów dla związków koordynacyjnych i nieorganicznych.

Przykłady:.

$BF_3 \bullet 2H_2O$

trifluoroboran—woda (1/2)
(wstępnie wybrany związek macierzysty-boran)
trifluorek boru—bis(woda)

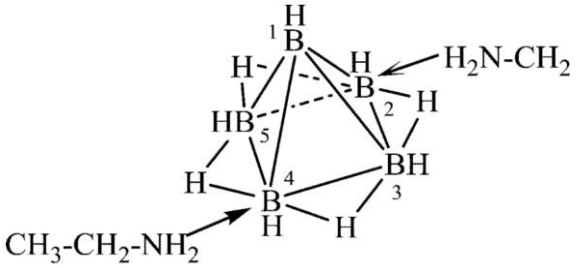
dihydrat trifluorku boru

$(CH_3)_3N{\rightarrow}BCl_3$

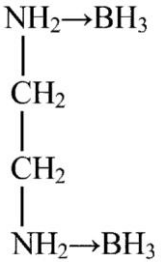
N,*N*-dimetylometanoamina—trichloroboran (1/1)
trichlorydo(*N*,*N*-dimetylometanoamina-κ*N*)bor

$(CH_3\text{-}CH_2)_2S{\rightarrow}H_2B\text{-}CH_3$

(etylosulfanylo)etan—metyloboran (1/1)
[(etylosulfanylo-κ*S*)etano]dihydrydo- metanidobor



etyloamina(*N*→*B*^{2})(*N*→*B*^{4})pentaboran(9) (2/1)
2,4-bis(etyloamina-κ*N*)-2,3:2,5:3,4:4,5-tetra-μ*H*-*nido*-pentaboran(9)



etano-1,2-diamina—boran (1/2)
etano-1,2-diamina—bis(boran)
μ-(etano-1,2-diamina-1κ*N*,2κ*N*')-bis(trihydrydobor)

$(CH_3)_3N \bullet (CH_3)_2S \bullet B_{12}H_{10}$

N,*N*-dimetylometanoamina— (metylosulfanylo)metan—dodekaboran(10) (1/1/1)
trimetyloamina—(metylosufanylo)metan—dodekaboran(10) (1/1/1)
(*N*,*N*-dimetylometanoamina)dekahydrydo[(metylosulfanylo)metano]dodekabor

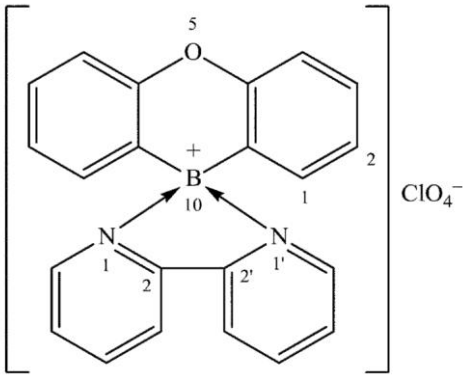
$H_3C\text{-}O\text{-}NH_2 \rightarrow BH_3$

O-metylohydroksyloamina(*N*—*B*)boran (1/1)
trihydrydo(*O*-metylohydroksyloamina-κ*N*)bor

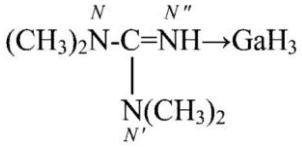
$(CH_3)_2NPF_2 \bullet B_4H_8$

difluorek(*P*—*B*) tetraboran (1/1) *N*,*N*-dimetylofosforamidawy
(N,*N*-dimetylofosforoamidawy difluorek-κ*P*)oktahydrydotetraboru

N-fenylomocznik(*N'*—*B*)boran (1/1)
trihydrydo(*N*-fenylomocznik-κ*N'*)bor



perchloran 2,2'-bipirydyno(N^1,N^1—*B*)-10*H*-fenoksaborin-10-ylium
perchloran (2,2'-bipirydyno-κN^1,κ$N^{1'}$)[2,2'-oksybis(benzen-1-ido-κC^1)]boru(1+)

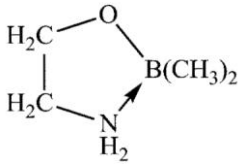


N,*N*,*N'*,*N'*-tetrametyloguanidyna (*N''*—*Ga*)galan (1/1)
1,1,3,3-tetrametyloguanidyna (N^2−*Ga*)- galan (1/1)
trihydrydo[1,1,3,3-tetrametyloguanidyno-κN^2]gal

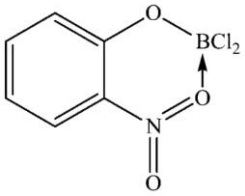
P-68.1.6.1.2 Wewnątrzcząsteczkowe addukty

Addukty wewnątrzcząsteczkowe tworzące się pomiędzy grupą mającą właściwości zasady Lewis'a, a grupą o właściwościach kwasu Lewis'a, znajdującymi się w ramach jednej cząsteczki oznacza sią symbolami atomów tworzącymi wiązanie donor-akceptor zgodnie z regułami opisanymi w rozdziale P-68.1.6.1, jednak umieszczając je w nawiasach na początku nazwy odpowiedniej części związku. Symbol określający proporcję składników jest zbędny.

Przykłady:

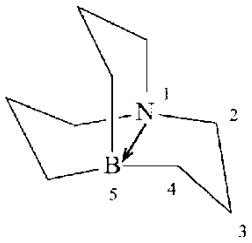


dimetyloborynan (*N*—*B*)-2-aminoetylu
(2-amino-κ*N*-etan-1-olano-κ*O*)dimetanidobor

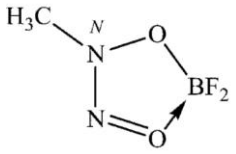


borodichlorydan (*O*—*B*)-2-nitrofenylu
(*O*—*B*)dichloro(2-nitrofenoksy)boran
dichlorydo(2-nitro-κ*O*-fenolano-κ*O*)bor

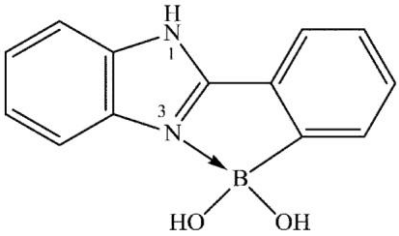
(*N*—*B*)-1-aza-5-borabicyklo[3.3.3]undekan
(pokazano numerację)
[3,3′,3′′-nitrylo-κ*N*-tris(propan-1-ylo-κC^1)]bor
[3,3′,3′′-nitrylo-κ*N*-tris(propan-1-ido-κC^1)]bor



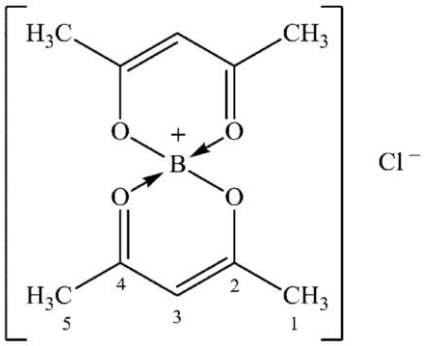
Uwaga: Jeśli związek jest przedstawiony jonowo, nazywa się go jako zwitterjon (jon obojnaczy (P-74.1.1).



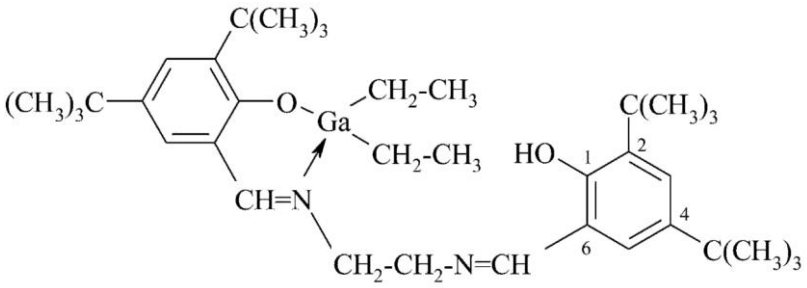
[2(*O*—*B*)]-*N*-[(difluoroboranylo)okso]-*N*-nitrozometyloamina
difluoro(*N*-nitrozo-κ*O*-*N*-oksydo-κ*O*-metanoamino)bor



kwas (N^3–*B*)[1*H*-benzoimidazol-2-ylo)- fenylo]boronowy
{nie (N^3-*B*)-2-[(dihydroksyboranylo)fenylo] benzoimidazol}
[2-(1*H*-benzoimidazol-2-ylo-κN^3)benzeno-κC^1]dihydroksybor

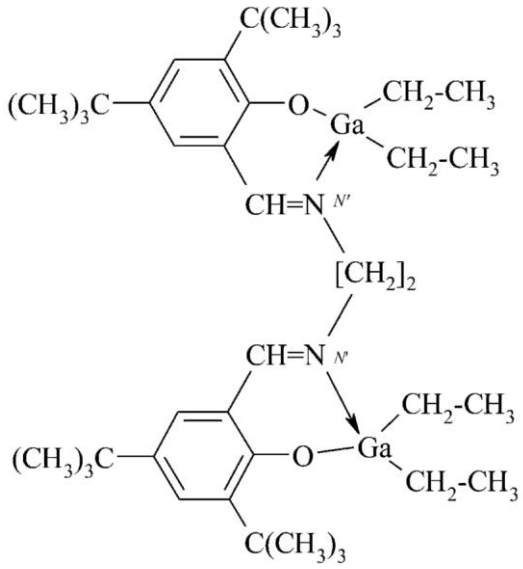


chlorek [2(*O*—*B*)]bis[(4-oksopent-2-en-2-ylo)oksy]boranylium
chlorek bis(4-okso-κ*O*-pent-2-en-2-olano-κ*O*)boru(1+)



2,4-di-*tert*-butylo-6-[({2-[({(*N*—*Ga*)-3,5-di-*tert*-butylo-2-[(dietylogalanylo)oksy]fenylo}metylideno)amino]etylo}imino)metylo]fenol

[2,4-di-*tert*-butylo-6-{[(2-{[3,5-di-*tert*-butylo-2-hydroksyfenylo)metylideno]amino}etylo)imino-κ*N*]metylo}fenolano-κ*O*]dietanidogal)



N,*N'*-bis({3,5-di-*tert*-butylo-2-[(dietylogalanylo)okso]fenylo}metylideno)-2(*N*—*Ga*)-etano-1,2-diamina

(μ-{2,2'-[etano-1,2-diylobis(azanylideno-1κ*N*:2κ*N'*-metanylideno)-bis(4,6-di-*tert*-bytylofenolano-1 κ*O*:2 κ*O'*})bis[di(etanido-1κ^2*C*^{1},2κ^2*C*^{1})gal]

P-68.2 NOMENKLATURA ZWIĄZKÓW PIERWIASTKÓW GRUPY 14

P68.2.0 Wprowadzenie

Nomenklatura związków węgla, jako podstawy związków organicznych, została opisana w poprzednich rozdziałach. Nie jest ona przedstawiana w tej części, chyba że wynika to z potrzeby porównania z innymi związkami..

Za wyjątkiem kwasu krzemowego, zachowanej nazwy dla $Si(OH)_4$ (poprzednio kwas ortokrzemowy), wszystkie związki krzemu oraz dużą liczbę związków germanu, cyny i ołowiu nazywa się zgodnie z zasadami, regułami i konwencjami nomenklatury podstawnikowej.

Związki germanu, cyny i ołowiu, które nie zwierają atomów węgla lub nie mogą być nazwane zgodnie z zasadami nomenklatury podstawnikowej, zdefiniowanej w tych zaleceniach, nazywa się zgodnie z zasadami nomenklatury koordynacyjnej. (patrz ref. 12).

Przyrostki dla związków germanu, cyny i ołowiu używa się teraz zgodnie ze starszeństwem klas (patrz P-41), co jest zmianą w porównaniu do tradycyjnych zasad gdzie tylko przedrostki były stosowane dla związków tych pierwiastków.

P-68.2.1 Macierzyste wodorki krzemu, germanu, cyny i ołowiu
P-68.2.2 Podstawniki pochodne macierzystych wodorków
P-68.2.3 Modyfikacja stopnia uwodornienia
P-68.2.4 Kwas krzemowy jako funkcyjny związek macierzysty
P-68.2.5 Nomenklatura podstawnikowa: tryb przyrostkowy
P-68.2.6 Nomenklatura podstawnikowa: tryb przedrostkowy

P-68.2.1 Macierzyste wodorki krzemu, germanu, cyny i ołowiu

P-68.2.1.1 Mononuklearne i acykliczne macierzyste wodorki
P-68.2.1.2 Cykliczne macierzyste wodorki

P-68.2.1.1 Mononuklearne i acykliczne macierzyste wodorki

Nazwy acyklicznych, macierzystych wodorków tworzy się zgodnie z ogólnymi regułami opisanymi w rozdziale P-21. Są one wstępnie wybranymi nazwami.

Przykłady: $^{13}H_3Sn\text{-}[SnH_2]_{11}\text{-}^{1}SnH_3$

$^{13}H_3Sn\text{-}[SnH_2]_{11}\text{-}^{1}SnH_3$ tridekastannan (wstępnie wybrana nazwa)

$^{5}H_3Ge\text{-}^{4}Se\text{-}^{3}GeH_2\text{-}^{2}Se\text{-}^{1}GeH_3$ trigermanoselenan (wstępnie wybrana nazwa)

$^{22}H_3Si\text{-}[O\text{-}SiH_2]_{20}\text{-}^{2}O\text{-}^{1}SiH_3$ dokozasiloksan (wstępnie wybrana nazwa)

$^{3}H_3Pb\text{-}^{2}Te\text{-}^{1}PbH_3$ diplumbatelluran (wstępnie wybrana nazwa)

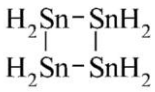
$^{12}CH_3\text{-}^{11}SiH_2\text{-}^{10}CH_2\text{-}^{9}CH_2\text{-}^{8}SiH_2\text{-}^{7}CH_2\text{-}^{6}CH_2\text{-}^{5}SiH_2\text{-}^{4}CH_2\text{-}^{3}CH_2\text{-}^{2}SiH_2\text{-}^{1}CH_3$

2,5,8,11-tetrasiladodekan (PIN)
etylenobis[2-(metylosililo)etylosilan]

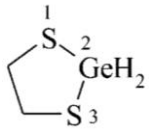
P-68.2.1.2 Cykliczne macierzyste wodorki

Nazwy i preferowane nazwy IUPAC cyklicznych wodorków tworzy się zgodnie z regułami opisanymi w rozdziałach od P-22 do P-28. Nazwy związków nie zawierających atomów węgla są wstępnie wybrane.

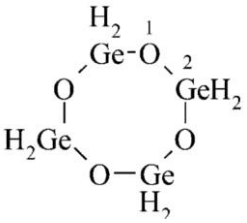
Przykłady:



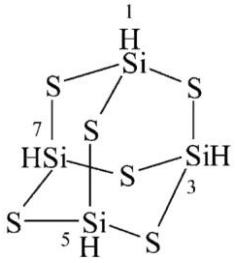
tetrastannetan
(wstępnie wybrana nazwa Hantzscha-Widmana)
cyklotetrastannan



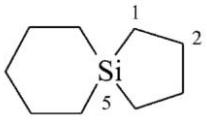
1,3,2-ditiogermolan (PIN)



1,3,5,7,2,4,6,8-tetraoksatetragermokan
(wstępnie wybrana nazwa Hantzscha-Widmana)
cyklogermoksan



2,4,6,8,10-pentatia-1,3,5,7-tetrasililaadamantan
(wstępnie wybrana nazwa)



5-silaspiro[4.5]dekan (PIN)

P-68.2.2 Podstawniki pochodne macierzystych wodorków

Nazwy podstawników $-XH_3$, $=XH_2$ i $\equiv XH$ pochodzących od mononuklearnych macierzystych wodorków gdzie X = Si, Ge, Sn, i Pb, ale nie B, tworzy się według metody (1) opisanej w P-29.2; wszystkie pozostałe podstawniki nazywa się z wykorzystaniem ogólnej metody (2) opisanej w P-29.2.

Przykłady:

$-SiH_3$

silil (wstępnie wybrany przedrostek)

$-GeH_3$

germyl (wstępnie wybrany przedrostek)

-SnH_3

stannyl (wstępnie wybrany przedrostek)

-PbH_3

plumbyl (wstępnie wybrany przedrostek)

-SiH_2-

silanodiyl (wstępnie wybrany przedrostek) (nie sililen)

-GeH_2-

germanodiyl (wstępnie wybrany przedrostek) (nie germylen)

-SnH_2-

stannanodiyl (wstępnie wybrany przedrostek) (nie stannylen)

-PbH_2-

plumbanodiyl (wstępnie wybrany przedrostek)

=SiH_2

sililiden (wstępnie wybrany przedrostek) (nie sililen)

=PbH_2

plumbyliden (wstępnie wybrany przedrostek) (nie plumbylen)

≡GeH

germylidyn (wstępnie wybrany przedrostek)

≡SnH

stannylidyn (wstępnie wybrany przedrostek)

≡SiH

sililidyn (wstępnie wybrany przedrostek)

-SiH=

silanylyliden (wstępnie wybrany przedrostek)

-SnH<

stannanotriyl (wstępnie wybrany przedrostek)

=Ge=

germanodiyliden (wstępnie wybrany przedrostek)

>Pb<

plumbanotetrayl (wstępnie wybrany przedrostek)

H_3Si-SiH_2

disilanyl (wstępnie wybrany przedrostek) (nie disilil)

$^{3}H_3Ge$-$^{2}GeH_2$-^{1}GeH=

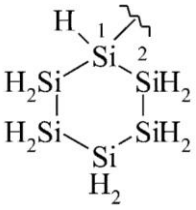
trigerman-1-ylidenyl (wstępnie wybrany przedrostek)

$–{}^{1}H_2Si$-$^{2}SiH_2–$

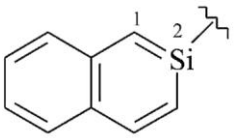
disilan-1,2-diyl (wstępnie wybrany przedrostek)

$^{2}SiH_3$-^{1}SiH<

disilan-1,1-diyl (wstępnie wybrany przedrostek)



heksasilinanyl
(wstępnie wybrany przedrostek)
cykloheksasilanyl



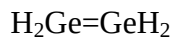
2-benzosilin-2-yl
(preferowany przedrostek)

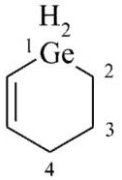
P-68.2.3 Modyfikacja stopnia uwodornienia

Podwójne wiązania wskazujemy końcówką 'en', jak opisano w P-31.1, a nasycenie struktury mancude - za pomocą przedrostków 'hydro' jak przedstawiono w P-31.2.

W obecnych zaleceniach przedrostki ‘hydro’ i ‘dehydro’ są rozłączne, ale nie są włączone do kategorii alfabetycznie wymienianych rozłącznych przedrostków (patrz P-14.4 oraz P-15.1.5.2, P-31.2, P-8.2).

Przykłady:





digermen (wstępnie wybrana nazwa) 1,2,3,4-terahydrogermin (PIN)

P-68.2.4 Kwas krzemowy jako funkcyjny związek macierzysty

Nomenklatura kwasu krzemowego (poprzednio ortokrzemowego) została przedstawiona w P-67.1.2. Kwas krzemowy jest modyfikowany jedynie przedrostkami pokazującymi funkcyjną zamianę atomem chalkogenu. Zamiana funkcyjna innymi atomami lub grupami nie jest zalecana. Nazwy soli, estrów i anhydrydów pochodzą od zachowanej nazwy kwas krzemowy. Amidy kwasu krzemowego są klasyfikowane jako aminy. Hydrazydy kwasu krzemowego traktuje się jako pochodne hydrazyny.

Nazwy podstawników pochodnych kwasu krzemowego tworzy się na bazie macierzystego wodorku 'silan' (P-67.1.4.2).

Przykłady:

trihydroksysilil
(wstępnie wybrana nazwa)

dihydroksy(sulfanylo)silyl
(wstępnie wybrana nazwa)

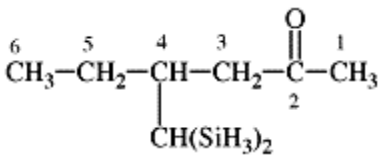
$Si(NH_2)_4$	$Si(NH\text{-}NH_2)_4$
silanotetraamina (wstępnie wybrana nazwa) (nie tetraamid krzemowy)	1,1′1″,1‴-silanotetraylotetrahydrazyna (wstępnie wybrana nazwa) (nie tetrahydrazyd krzemowy)

P-68.2 .5 Nomenklatura podstawnikowa: tryb przyrostkowy

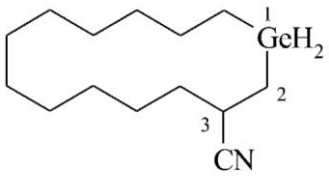
Tradycyjnie, związki krzemu nazywa się za pomocą przyrostków i przedrostków; związki germanu, cyny i ołowiu nazywa się wyłącznie z wykorzystaniem przedrostków. Dla pełnej systematyczności zaleca się używanie przyrostków, kiedy są dostępne, do tworzenia preferowanych nazw IUPAC, zgodnie z porządkiem starszeństwa przyrostków oraz pierwszeństwa przyrostków przed przedrostkami.

Przykłady:

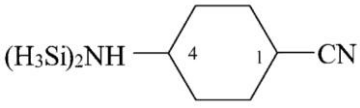
$CH_3\text{-}Si(NH_2)_3$	$H_3Si\text{-}\overset{N}{N}H\text{-}\overset{1}{S}iH(CH_3)\text{-}\overset{N'}{N}H\text{-}SiH_3$
1-metylosilanotriamina (PIN)	1-metylo-*N*,*N*′-disililosilanodiamina (PIN) (nie 3-metylotrisilazan)
$(CH_3)_2Si(OH)_2$	$CH_3\text{-}NH\text{-}Si(OH)_3$
dimetylosililodiol (PIN)	(metyloamino)sililotriol (PIN)
$(CH_3)_3Si\text{-}COOH$	$CH_3\text{-}GeH_2\text{-}SH$
kwas trimetylosililokarboksylowy (PIN)	metylogermanylotiol (PIN)



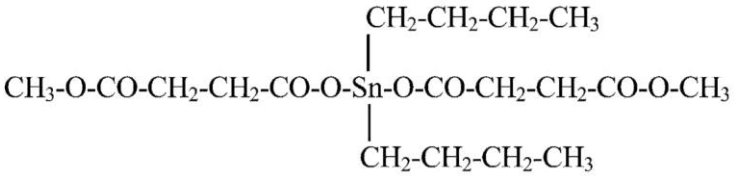
4-(disililometylo)heksan-2-on (PIN)
4-[(bis(silanylo)metylo]heksan-2-on



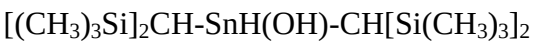
1-germacyklotetradekano-3-karbonitryl (PIN)
3-cyjano-1-germacyklotetradekan



4-(disililoamino)cykloheksano-1-karbonitryl (PIN)
4-[bis(silanylo)amino]cykloheksano-karbonitryl



dibutanodian dimetylu (dibutylo)stannanodiylu (PIN; zob. P-65.6.3.3.4)
dibutylobis[(4-metoksy-4-oksobutanoilo)oksy]stannan



bis[bis(trimetylosililo)metylo]stannanol (PIN)
hydroksybis[(trimetylosililo)metylo]stannan

P-68.2.6 Nomenklatura podstawnikowa: tryb przedrostkowy

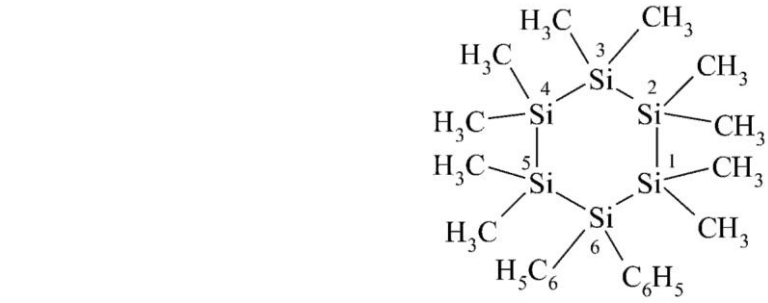
Przedrostki są stosowane w nomenklaturze zamiennej na dwa sposoby.

P-68.2.6.1 Podstawione macierzyste wodorki
P-68.2.6.2 Pierwszeństwo pierwiastków grupy 14

Gdy jest to wymagane, struktury wyjściowe oraz przedrostki wybiera się zgodnie z pierwszeństwem klas związków (zob. P-41).

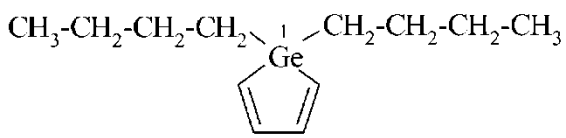
P-68.2.6.1 Podstawione macierzyste wodorki

Przykłady:

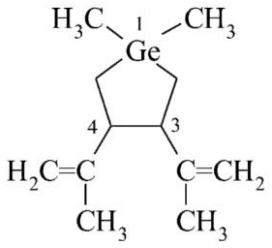


di(dodecylo)silan

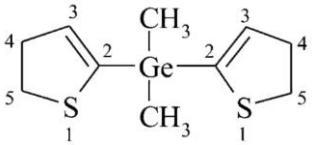
1,1,2,2,3,3,4,4,5,5-dekametylo-6,6-difenyloheksasilinan (PIN; nazwa Hantzscha-Widmana)
1,1,2,2,3,3,4,4,5,5-dekametylo-6,6-difenylocykloheksasilan



1,1-dibutylo-1*H*-germol (PIN)
(uwaga: wskazany atom wodoru)



1,1-dimetylo-3,4-di(prop-1-en-2-ylo)germolan (PIN)
3,4-diizopropenylo-1,1-dimetylogermolan

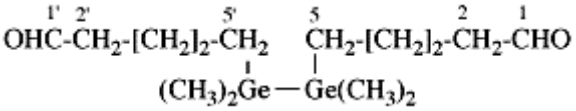


bis(4,5-dihydrotiofen-2-ylo)dimetylogerman (german jest starszy od siarki) (PIN)

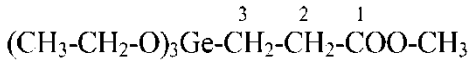
P-68.2.6.2 Starszeństwo pierwiastków grupy 14

W przypadku obecności grup o wyższym starszeństwie macierzyste struktury i przedrostki wybiera sią zgodnie z porządkiem starszeństwa (patrz. P-41 i P-44) i regułami wyboru preferowanej nazwy (patrz. P-45).

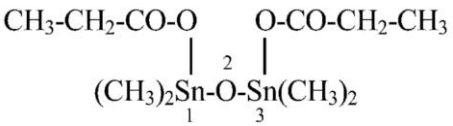
Przykłady:



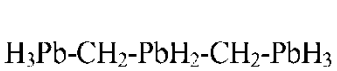
5,5'-(1,1,2,2-tetrametylodigermano-1,2-diylo)di(pentanal) (PIN)



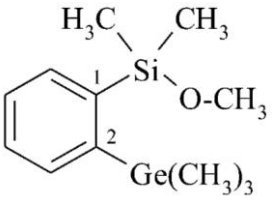
3-(trietoksygermylo)propionian metylu (PIN)



dipropionian 1,1,3,3-tetrametylodistannooksano-1,3-diylu (PIN)

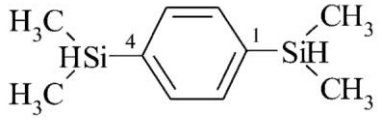


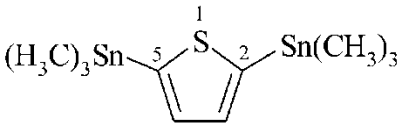
[plumbanodiylobis(metyleno)]bis(plumban) (PIN)
bis(plumbylometylo)plumban



metoksydimetylo[2-(trimetylogermylo)fenylo]silan (PIN) (Si jest starsze od Ge)

(1,4-fenyleno)bis(dimetylosilan) (PIN)





(tiofeno-2,5-diylo)bis(trimetylostannan) (Sn ważniejsza od S. zob. P-41)

$[(CH_3)_3Si]_2CH\text{-}SnH(OH)\text{-}CH[Si(CH_3)_3]_2$

bis[bis(trimetylosililo)metylo]stannanol (PIN)
według P-41, tabela 4.1, klasa 17 (a nie 26 czy 28)
hydroksybis[bis(trimetylosililo)metylo]stannan

P-68.3 NOMENKLATURA ZWIĄZKÓW PIERWIASTKÓW GRUPY 15

Do celów nomenklaturowych związki pierwiastków grupy 15 podzielono na trzy kategorie:

(1) Związki azotu nazywa się jako aminy i iminy (patrz P-62), amidy, hydrazydy, imidy, amidyny, amidrazony, hydrazydyny, nitryle i cyjanki (patrz P-66), albo podstawnikowo na bazie macierzystych wodorków, takich jak hydrazyna, triazan itp., lub jako pochodne funkcyjnych macierzystych związków, jak hydroksyloamina (patrz P-68.3.1). Ze względu na podobieństwo kwasu azonowego $HN(OH)_2$ i kwasu azynowego $H_2N(OH)$ są one omawiane w rozdziale P-67 razem z oksokwasami P, As i Sb.

(2) Związki fosforu, arsenu i antymonu omawia się łącznie w P-68.3.2 ze względu na znaczenie nomenklatury klasowo-funkcyjnej opartej na ich kwasach wykorzystywanych jako funkcyjne związki macierzyste. Pozostałe związki nazywa się podstawnikowo z użyciem macierzystych wodorków.

(3) Związki bizmutu zawierające atomy węgla, które mogą być nazywane według zasad nomenklatury podstawnikowej, tak jak je przedstawiono w tych zaleceniach, nazywa się przez podstawienie macierzystych wodorków takich jak bizmutan BiH_3 (patrz. P-68.3.3). Związki bizmutu nie zawierające atomów węgla lub takie, których nie można nazywać zgodnie z zasadami nomenklatury podstawnikoweji, zdefiniowanymi w obecnych zalecaniach dla związków węgla, nazywa się zgodnie z zasadami nomenklatury koordynacyjnej (odn. 12).

P-68.3.1 Związki azotu

P-68.3.1.0 Wprowadzenie
P-68.3.1.1 Hydroksyloaminy, oksymy, kwasy nitrolowe i nitrozolowe
P-68.3.1.2 Hydrazyna i związki pokrewne
P-68.3.1.3 Diazen i związki pokrewne
P-68.3.1.4 Poliazany

P-68.3.1.0 Wprowadzenie

Wiele acyklicznych związków azotu ma nazwy zachowane lub nazwy klasowo- funkcyjne. Nazwy te pozostawiono do stosowania w ogólnej nomenklaturze, ale dla większości acyklicznych związków azotu preferowane nazwy IUPAC tworzy się systematycznie. Hydroksyloamina, mocznik, guanidyna i formazan są zachowane jako preferowane nazwy IUPAC. Inne zachowane nazwy zostały wstawione do systematycznej nomenklatury podstawnikowej; oksym pozostawiono jedynie jako nazwę klasowo-funkcyjną.

P-68.3.1.1 Hydroksyloaminy, oksymy, kwasy nitrolowe oraz nitrozolowe

Kilka związków zawierających jeden lub dwa atomy azotu należy do grup określanych jako: hydroksyloaminy, oksymy, kwasy nitrolowe lub nitrozolowe. Metodologię ich nazywania zilustrowano w niniejszym rozdziale. Nitro i nitrozo związki, izocyjaniany i izonitryle były dyskutowane w rozdziale P-61.

Nazywa klasy ′hydroksyloamina′, wstępnie wybrana nazwa, jest także używana jako funkcyjny związek macierzysty. Nazwa klasy ′oksym′ jest stosowana jako klasowo-funkcyjny modyfikator. Kwasy nitrolowe i nitrozolowe nazywa się jako oksymy lub pseudoketony.

P-68.3.1.1.1 Hydroksyloaminy
P-68.3.1.1.2 Oksymy
P-68.3.1.1.3 Kwasy nitrolowe i nitrozolowe

P-68.3.1.1.1 Hydroksyloaminy

Zachowana nazwa hydroksyloamina jest wstępnie wybraną nazwą i oznacza strukturę H_2N-OH. Jest to funkcyjny związek macierzysty z możliwością pełnego podstawienia, wyjątkowo nawet na atomie azotu. Podstawienie na atomie azotu lub tlenu w hydroksyloaminie może doprowadzić do utworzenia funkcji starszej od hydroksyloaminy, co uzasadnia systematyczną nazwę opartą na wyższej klasie wskazującej nową funkcję.

P-68.3.1.1.1.1 Podstawione hydroksyloaminy w rodzaju R-NH-OH lub RR′N-OH nazywa się jako *N*-pochodne pochodne starszej aminy.

Przykłady:

CH_3-NH-OH

N-hydroksymetanoamina (PIN)
N-metylohydroksyloamina

$(CH_3)_2N$-OH

N-hydroksy-*N*-metylometanoamina (PIN)
N,*N*-dimetylohydroksyloamina

H_3Si-NH-OH

N-hydroksylosilanoamina (PIN)
N-sililohydroksyloamina

H_2B-NH-OH

N-hydroksyloboranoamina (PIN)
N-boranylohydroksyloamina

N-Podstawienie hydroksyloaminy grupą acylową powoduje powstanie kwasu hydroksamowego, a związki nazywa się jako *N*-hydroksyamidy (zob. P-65.1.3.4).

Przykłady:

CH_3-CO-NH-OH	CH_3-SO_2-NH-OH
N-hydroksyacetamid (PIN)	*N*-hydroksymetanosulfonamid (PIN)
CH_3-CH_2-CO-NH-OH	*N*-hydroksypropanamid (PIN) (już nie kwas propanohydroksamowy lub kwas propionohydroksamowy)

P-68.3.1.1.1.2 Podstawienie na atomie tlenu hydroksyloaminy

Podstawienie hydroksyloaminy na atomie tlenu przez grupy hydrokarbylowe lub acylowejes przedstawione jako *O*-podstawienie. Nazwy takie jak 'alkoksyaminy' nie są rekomendowane, natomiast 'peroksyaminy' nie zostały nigdy uznane jako klasa związków.

Przykłady:

H_2N-O-CH_3	H_2N-O-C_6H_5
O-metylohydroksyloamina (PIN) (nie metoksyamina)	*O*-fenylohydroksyloamina (PIN) (nie fenoksyamina)
H_2N-O-CH_2-CH_2-O-NH_2	*O,O'*-(etano-1,2-diylo)bis(hydroksyloamina) (PIN)
H_2N-O-CO-C_6H_5	H_2N-OSO-CH_3
O-benzoilohydroksyloamina (PIN) (nie benzoesan azanylu)	*O*-(metylosulfinylo)hydroksyloamina (PIN) (nie metanosulfinian azanylu)

O-Podstawienie w hydroksyloaminie przez -NHR lub -NRR' prowadzi do *N*-(aminooksy)amin, a nie do diazoksanów.

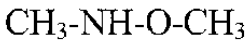
Przykład:

H_2N-O-$\overset{N}{N}$H-CH_3	*N*-(aminooksy)metyloamina (PIN) (nie 1-metylodioksazan)

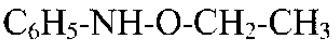
P-68.3.1.1.1.3 *N,O*-Dwupodstawione pochodne hydroksyloaminy

Podstawienie hydroksyloaminy zarówno na atomie azotu jak i tlenu prowadzi do *O*-podstawionych amin.

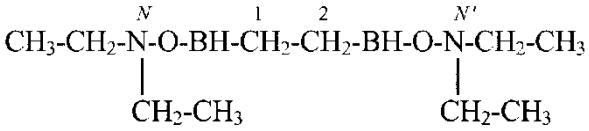
Przykłady:



N-metoksymetanoamina (PIN)
N,*O*-dimetylohydroksyloamina



N-etoksyanilina (PIN)
O-etylo-*N*-fenylohydroksyloamina



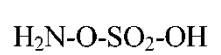
N,*N*′-[etano-1,2-diylobis(boranodiylooksy)bis(*N*-etyloamina) (PIN)
O,*O*′-[etano-1,2-diylobis(boranodiylo)bis *N*,*N*-dietylohydroksyloamina

Uwaga: Dla tego związku nie można wykorzystać nomenklatury zamiennej (′a′) szkieletu ponieważ charakterystyczna grupa aminowa nie byłaby rozpoznana i łańcuch ′a′ nie może kończyć się atomem tlenu.

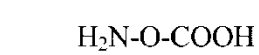
P-68.3.1.1.1.4 Podstawienie hydroksyloaminy przez grupy charakterystyczne zazwyczaj wyrażane jako przyrostki

Hydroksyloamina jest funkcyjnym związkiem macierzystym, do którego, wyjątkowo, mogą być przyłączone do atomu tlenu przyrostki określające charakterystyczne grupy takie jak kwasy, amidy, etc, W nazwach lokant ′*O*′ jest podawany przed przyrostkiem.

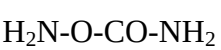
Przykład:



kwas hydroksyloamino-*O*-sulofonowy
(wstępnie wybrana nazwa)
(nie sulfonian wodoru azanylu)



kwas hydroksyloamino-*O*-karboksylowy
(PIN)
(nie karbonian wodoru azanylu)



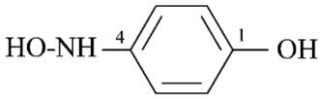
hydroksyloamino-*O*-karboksyamid (PIN)
(nie karbaminian azanylu)

P-68.3.1.1.1.5 Hydroksyloamina wyrażana jako przedrostki

W obecności charakterystycznej grupy mającej pierwszeństwo do wymieniania jako przyrostek lub w obecności macierzystego wodorku o wyższym starszeństwie, stosuje się odpowiednie zespolone albo kompleksowe przedrostki:

-NH-OH	hydroksyloamino (wstępnie wybrany przedrostek)
>N-OH	hydroksyazanodiyl (wstępnie wybrany przedrostek)
-O-NH_2	aminooksy (wstępnie wybrany przedrostek)

Przykład:



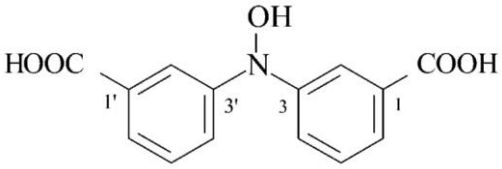
4-(hydroksyloamino)fenol (PIN)

$H_2N\text{-}O\overset{2}{C}H_2\text{-}\overset{1}{C}H_2\text{-}NH_2$

2-(aminookso)etano-1-amina (PIN)

$H_2N\text{-}NH\text{-}CH_2\text{-}O\text{-}NH_2$

[(aminookso)metylo]hydrazyna (PIN)



kwas 3,3′-(hydroksyazanodiylo)dibenzoesowy (PIN)

P-68.3.1.1.1.6 Chalkogenowe analogi hydroksyloaminy

Chalkogenowe analogi hydroksyloaminy wskzuje się odpowiednimi przedrostkami zamiany funkcji 'tio', 'seleno' lub 'telluro'. Niekiedy, aby uniknąć niejasności, wymagane są nawiasy. Podstawienie przebiega zgodnie z zasadami przedstawionymi powyżej dla nazywania pochodnych hydroksyloaminy.

Przykład:

$H_2N\text{-}SH$	$CH_3\text{-}NH\text{-}SH$
tiohydroksyloamina (wstępnie wybrana nazwa)	*N*-sulfanylometyloamina (PIN) *N*-metylo(tiohydroksyloamina)
$CH_3\text{-}CO\text{-}NH\text{-}SH$	$H_2N\text{-}S\text{-}CH_3$
N-sulfanyloacetamid (PIN)	*S*-metylo(tiohydroksyloamina) (PIN)

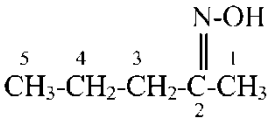
P-68.3.1.1.2 Oksymy

Związki o wzorze ogólnym R-CH=N-OH lub RR′=N-OH noszą nazwę klasową ‘oksymy’ i zostały następnie sklasyfikowane, odpowiednio, jako ‘aldoksymy’ oraz ‘ketoksymy’. W ogólnej nomenklaturze nazywa się je zgodnie z zasadami nomenklatury klasowo-funkcyjnej podając nazwę klasy ′oksym′ jako oddzielne słowo przed nazwą aldehydu lub ketonu. Preferowane nazwy IUPAC tworzy się podstawnikowo jako ‘ylidenowe’ pochodne hydroksyloaminy. Związki zawierające grupę =N-OR nazywa się podstawnikowo jako alkoksy podstawione iminy. W przypadku obecności

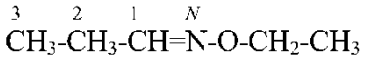
charakterystycznych grup mających pierwszeństwo do wymieniania jako przyrostki, w nomenklaturze podstawnikowej oksymy oznacza się przedrostkiem 'hydroksyimino'.

> W tych zaleceniach preferowane nazwy podstawnikowe IUPAC dla oksymów jako 'ylidenowych' pochodnych hydroksyloaminy tworzy się częściej, niż za pomocą nomenklatury klasowo-funkcyjnej, jak podawano we wcześniejszych zaleceniach.

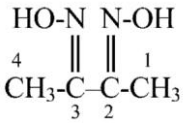
Przykład:



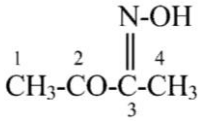
pentan-2-ylidenohydroksyloamina (PIN)
oksym pentan-2-onu



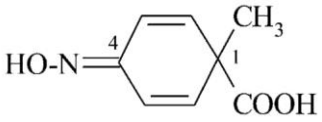
N-etoksypropylo-1-imina (PIN)
O-etoksyoksym propanalu



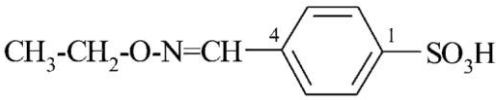
(butano-2,3-diylideno)bis(hydroksyloamina) (PIN)
dioksym butano-2,3-dionu



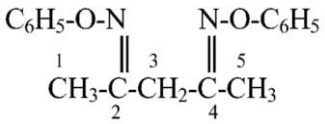
3-(hydroksyimino)butan-2-on (PIN)
oksym butano-2,3-dionu



kwas 4-(hydroksyimino)-1-metylocykloheksa-2,5-dieno-1-karboksylowy (PIN)

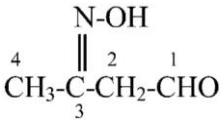


kwas 4-[(etoksyimino)metylo]benzeno-1-sulfonowy (PIN)

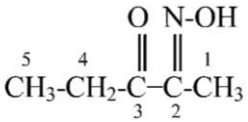


N^2,N^4-difenoksypentano-2,4-diimina (PIN)

bis(*O*-fenylooksym) pentan-2,4-dionu



3-(hydroksyimino)butanal (PIN)

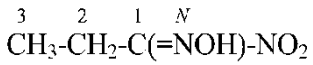


2-(hydroksyimino)pentan-2-on (OIN)

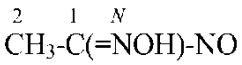
P-68.3.1.1.3 Kwasy nitrolowe oraz nitrozolowe

Związki o ogólnym wzorze R-C(=NOH)-NO_2 oraz R-C(NOH)-NO ogólnie nazywa się, odpowiednio, kwasami nitrolowymi i kwasami nitrozolowymi. W ogólnej nomenklaturze nazywa się je podstawnikowo jako oksymy pseudoketonów. Preferowane nazwy IUPAC tworzy się analogicznie jak dla ‘oksymów’ (patrz P-68.3.1.1.2). Jak do tej pory, związki te były nazywane za pomocą nomenklatury klasowo-funkcyjnej jako oksymy aldehydów podstawionych w pozycji 1 grupą nitrową lub nitrozową.

Przykład:



N-(1-nitropropylideno)hydroksyloamina (PIN)
oksym 1-nitropropanalu
oksym 1-nitropropan-1-onu



N-(1-nitrozoetylideno)hydroksyloamina (PIN)
oksym1-nitrozoacetaldehydu
oksym 1-nitrozoetan-1-onu

P-68.3.1.2 Hydrazyna i związki pokrewne: hydrazony, azyny, semikarbazydy, semikarbazony oraz karbonohydrazydy

P-68.3.1.2.1 Hydrazyna i jej pochodne

Hydrazyna jest zachowaną nazwą opisującą strukturę H_2N-NH_2; jest to wstępnie wybrana nazwa, preferowana względem systematycznej heteranowej nazwy ‘diazan’.

Podstawniki pochodzących od hydrazyny nazywa się systematycznie:

Wstępnie wybrane przedrostki pochodzące od wstępnie wybranego macierzystego wodorku hydrazyna tworzy się systematycznie. Dla H_2N-NH– ‘hydrazynyl’; dla H_2N-N= ‘hydrazynyliden’; dla =N-N= ‘hydrazynodiyliden’; dla -HN-NH- ‘hydrazyno-1,2-diyl’. Tradycyjne nazwy, odpowiednio, ‘hydrazyno’, ‘hydrazono’, ‘azyno’ czy ‘hydrazo’, nie są zalecane, nawet w ogólnej nomenklaturze.

H_2N-NH- hydrazynyl (wstępnie wybrany przedrostek)

diazanyl
(nie hydrazyno)

H_2N-N= hydrazyliden (wstępnie wybrany przedrostek)
diazanyliden
(nie hydrazono)

=N-N= hydrazynodiyliden (wstępnie wybrany przedrostek)
diazanodiyliden
(nie azyno)

-NH-NH- hydrazyno-1,2-diyl (wstępnie wybrany przedrostek)
diazano-1,2-diyl
(nie hydrazo)

Jako macierzysty wodorek, hydrazyna jest numerowana cyfrowymi lokantami 1 i 2, a nie *N* i *N′*. Podstawienie hydrazyny grupami hydrokarbylowymi i grupami charakterystycznymi wyraża się przyrostkami i przedrostkami.

Przykład:

$(CH_3)_2\overset{1}{N}\text{-}\overset{2}{N}H_2$

1,1-dimetylohydrazyna (PIN)

C_6H_5-NH-NH_2

fenylohydrazyna (PIN)

H_2N-NH-$\overset{1}{C}H_2$-$\overset{N}{N}H_2$

1-hydrazynylometyloamina (PIN)

H_2N-NH-COOH

kwas hydrazynylokarboksylowy (PIN)
(nie kwas karbazowy)

F_2N-NF_2

tetrafluorohydrazyna (ze wstępnie wybranej nazwy hydrazyna)

H_2N-NH-CH_2-CN

hydrazynyloacetonitryl (PIN)

H_2N-CO-CH_2-$\overset{3}{C}H_2$-NH-NH-$\overset{3'}{C}H_2$-CH_2-CO-NH_2

3,3′-(hydrazyno-1,2-diylo)dipropanoamid (PIN)
(nie 3,3′-hydrazodipropanoamid)

P-68.3.1.2.2 Hydrazony

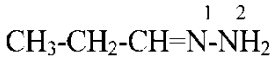
Związki o ogólnym wzorze RCH=N-NH_2 oraz RR′C=N-NH_2 określa się jako ‘hydrazony’, a ich nazwy tworzy się na dwa sposoby:

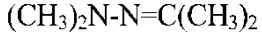
(1) podstawnikowo, jako pochodne macierzystego wodorku ‘hydrazyna’, H_2N-NH_2;
(2) nomenklaturą klasowo-funkcyjną, używając nazwy klasy ‘ hydrazon’.

Metoda (1) generuje preferowane nazwy IUPAC.

W obecnych zaleceniach preferowane nazwy IUPAC dla hydrazonów tworzy się podstawnikowo jako ‘ylidenowych’ pochodnych hydrazyny, a nie nomenklaturą klasowo-funkcyjną jak to było przedstawione w poprzednich zaleceniach.

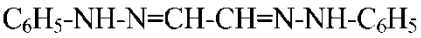
Przykład:



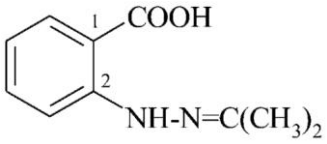


propylidenohydrazyna (PIN)
hydrazon propanalu

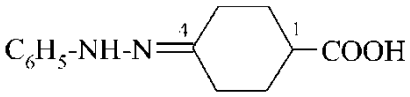
1,1-dimetylo-2-(propan-2-ylideno)hydrazyna (PIN)
1,1-dimetylo-2-(1-metyloetylideno)hydrazyna
dimetylohydrazon acetonu



1,1′-(etano-1,2-diylideno)bis(2-fenylohydrazyna) (PIN)
bis(fenylohydrazon) etano-1,2-dionu



kwas 2-[(propan-2-ylideno)hydrazynylo]benzoesowy (PIN)
kwas 2-[(1-metyloetylideno)hydrazynylo]benzoesowy



kwas 4-(fenylohydrazynylideno)cykloheksylo-1-karboksylowy (PIN)

P-68.3.1.2.3 Azyny

P-68.3.1.2.3.1 Związki o ogólnym wzorze R-CH=N-N=CH-R lub RR′C=N-N=CRR′ nazywane są ‘azynami’, ich nazwy tworzymy na dwa sposoby:

(1) podstawnikowo, jako pochodne hydrazyny;
(2) nomenklaturą klasowo-funkcyjną, używając nazwę klasy 'azyna'.

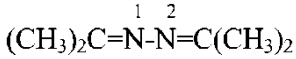
Metoda (1) prowadzi do preferowanych nazw IUPAC.

W przedstawionych zaleceniach preferowane nazwy IUPAC dla azyn tworzy się podstawnikowo jako 'ylidenowych' pochodnych hydrazyny, a nie jak przedstawiono w poprzednich zaleceniach, za pomocą nomenklatury klasowo-

funkcyjnej.

.

Przykład:



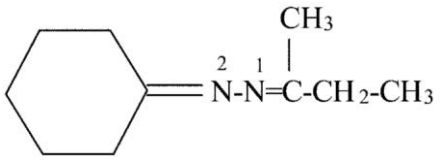
di(propan-2-ylideno)hydrazyna (PIN)
bis(1-metyloetylideno)hydrazyna
azyna acetonu

P-68.3.1.2.3.2 Azyny są symetrycznymi pochodnymi hydrazyny. Jednak jeżeli warunek ten nie jest spełniony, związki o strukturze R-CH=N-N=CH-R′ lub RRC=N-N=CR′R′ nazywa się na dwa sposoby:

(1) jako niesymetryczne pochodne hydrazyny;
(2) jako 'ylidenohydrazony' pochodne aldehydów lub ketonów.

Metoda (1) prowadzi do preferowanych nazw IUPAC.

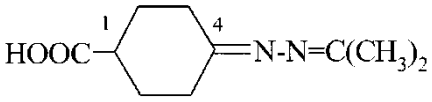
Przykład:



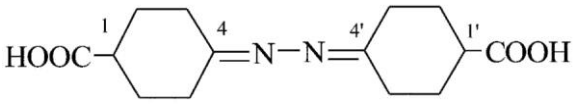
(butan-2-ylideno)(cykloheksylideno)hydrazyna (PIN)
cykloheksylideno(1-metylopropylideno)hydrazyna
butan-2-ylidenohydrazon cykloheksanonu

P-68.3.1.2.3.3 W obecności grup funkcyjnych mających starszeństwo, przedrostek ′hydrazynyliden′ jest używany podstawnikowo, a w nomenklaturze multiplikacyjnej wykorzystywany jest przedrostek 'hydrazynodiyliden'.

Przykład:



kwas 4-[(propan-2-ylideno)hydrazynylideno]cykloheksano-1-karboksylowy (PIN)
kwas 4-[(1-metyloetylideno)hydrazynylideno]cykloheksano-1-karboksylowy

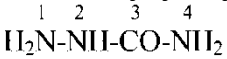


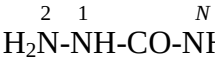
kwas 4,4'-hydrazynodiylidenodi(cykloheksano-1-karboksylowy) (PIN)

P-68.3.1.2.4 Semikarbazydy

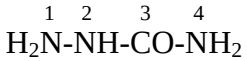
Semikarbazydy są amidami kwasów hydrazynokarboksylowych. Ponieważ kwasy oraz amidy wskazywane przyrostkami są ważniejsze od kwasów oraz amidów modyfikowanych podstawieniem funkcyjnym, ich nazwy są ważniejsze od ‘karbonohydrazydów’ oraz ‘amidów karbonohydrazydów’.

Semikarbazyd to tradycyjna nazwa związku o wzorze H_2N-NH-CO-NH_2, systematycznie nazwanego ′hydrazynokarboksyamidem′. Nazwa systematyczna jest również preferowaną nazwą IUPAC. W nazwach systematycznych zalecana jest zwyczajowa numeracja atomów, jednak dla semikarbazydy mają specjalną numerację.





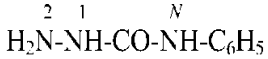
hydrazynokarboksyamid (PIN)



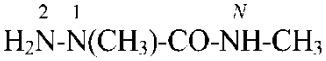
semikarbazyd

Cyfrowe lokanty nie są już używane dla macierzystej nazwy ‘semikarbazyd’ w preferowanych nazwach IUPAC.

Przykład:



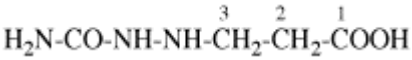
N-fenylohydrazynokarboksamid (PIN)
4-fenylosemikarbazyd



N,1-dimetylohydrazyno-1-karboksamid (PIN)
2,4-dimetylosemikarbazyd

Jako przedrostek, grupa -HN-NH-CO-NH_2 nazywana jest: ‘semikarbazydo’, ‘2-karbamoilohydrazyn-1-yl’ (preferowany przedrostek) lub ‘2-(aminokarbonylo)hydrazyn-1-yl’.

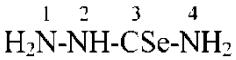
Przykład:



kwas 3-(2-karbamoilohydrazyn-1-ylo)propanowy (PIN)

Chalkogenowe analogi nazywa się systematycznie tak jak to opisano dla amidów albo nomenklaturą zamienną funkcji z wykorzystaniem określenia klasy ‘semikarbazyd’ modyfikowanego przedrostkami zamiany ‘tio-‘, ‘seleno-‘ i ‘telluro-‘; np. ‘tiosemikarbazyd’.

hydrazynokarboselenoamid (PIN)



selenosemikarbazyd

P-68.3.1.2.5 Semikarbazony

Związki o ogólnym wzorze R-CH=N-NH-CO-NR′R″ lub RR′C=N-NH-CO-NR‴R⁗ ogólnie nazywa się ‘semikarbazony’. Ich nazwy tworzy się na dwa sposoby:

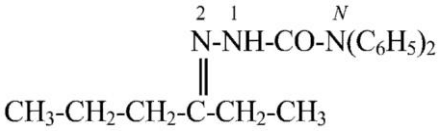
(1) podstawnikowo, z wykorzystaniem funkcyjnego związku macierzystego ‘hydrazynokarboksamid’;

(2) z modyfikatorem klasy ‘semikarbazon’ umieszczony przed nazwą odpowiedniego aldehydu lub ketonu.

Metoda (1) prowadzi do preferowanych nazw IUPAC.

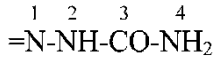
Cyfrowe lokanty nie są już stosowane w nazwie funkcyjnej klasy ′semikarbazon′ w preferowanych nazwach IUPAC.

Przykład:

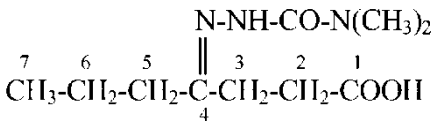


(heksan-3-ylideno)-*N*,*N*-difenylohydrazynokarboksyamid (PIN)
(1-etylobutylideno)- *N*,*N*-difenylohydrazynokarboksyamid
4,4-difenylosemikarbazon heksan-3-onu

Zespolony przedrostek ‘karbamoilohydrazyliden’ jest wykorzystywany w obecności charakterystycznej grupy która jest preferowane jako przyrostek. Przedrostek ten, jest preferowany względem tradycyjnej nazwy ‘semikarbazono’, jego struktura jest numerowana następująco:

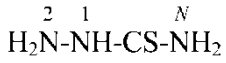


Przykład:

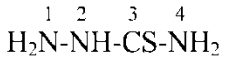


kwas 4-[(dimetylokarbamoilo)hydrazylideno]heptanowy (PIN)
kwas 4-(4,4-dimetylosemikarbazono)heptanowy

Chalkogenowe analogi semikarbazonów, aby otrzymać preferowaną nazwę IUPAC nazywa się systematycznie tak jak to opisano dla amidów, lub nomenklaturą zamienną funkcji wymienną z wykorzystaniem nazwy klasy ‘semikarbazon’ modyfikowanego przedrostkami zamiany ‘tio-‘, ‘seleno-‘i ‘teluro-‘; np. ‘tiosemikarbazon’. Przedrostek ‘karbamotioilohydrazylideno’ jest preferowany względem tradycyjnego przedrostka ‘tiosemikarbazono’.

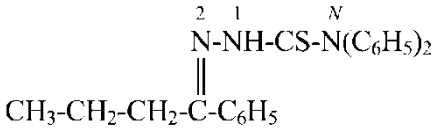


hydrazynokarbotioamid (PIN)

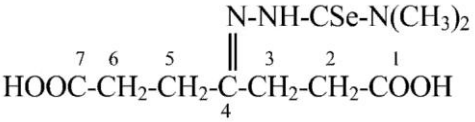


tiosemikarbazyd

Przykład:



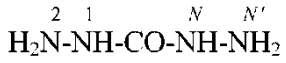
N,*N*-difenylo(2-fenylobutylideno)hydrazyno-1-karbotioamid (PIN)
4,4-difenylotiosemikarbazon 1-fenylobutan-1-onu



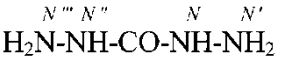
kwas 4-[(dimetylokarbamoselenoilo)hydrazylideno]heptanodiowy (PIN)
kwas 4-[4,4-dimetylo(selenosemikarbazono)]heptanodiowy

P-68.3.1.2.6 Hydrazynokarbohydrazyd i jego pochodne

P-68.3.1.2.6.1 Preferowaną nazwą IUPAC dla związku H_2N-NH-CO-NH-NH_2 jest ′hydrazynokarbohydrazyd′. Nazwa ′dihydrazyd karbonowy′ jest również zalecana, jednak tylko dla ogólnej nomenklatury; nazwy ‘karbonohydrazyd', 'karbohydrazyd' i 'karbazyd' nie są zalecane. Systematyczne numerowanie stosuje się w nazwach systematycznych. Specjalna numeracja przypisana dihydrazydowi karbonowemu jest przedstawiona poniżej:



hydrazynokarbohydrazyd (PIN)



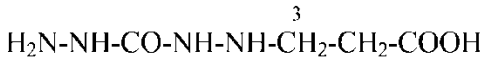
dihydrazyd karbonowy

Przykład:

N′-benzylideno-2-etylideno-1-metylohydrazyno-1-karbohydrazyd (PIN)
(łańcuch podwójnie podstawiony jest łańcuchem głównym)
dihydrazyd *N‴*-benzylideno-*N′*-etylideno-*N*-metylokarbonowy
(nie dihydrazyd *N′*-benzylideno-*N‴*-etylideno-*N″*-metylokarbonowy;
zestaw lokantów *N*, *N′*, *N‴* jest niższy od *N′*, *N″*, *N‴*)

Jako przedrostki, grupy -NH-NH-CO-NH-NH_2 i =N-NH-CO-NH-NH_2 nazywa się, odpowiednio, ‘2-(hydrazynokarbonylo)hydrazyn-1-yl’ i ‘(hydrazynokarbonylo)hydrazyliden’; te nazwy są preferowanymi przedrostkami.

Przykład:



kwas 3-[2-(hydrazynokarbonylo)hydrazyn-1-ylo]propanowy (PIN)

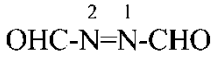
P-68.3.1.3 Diazeny i związki pokrewne

P-68.3.1.3.1 Podstawienie diazenów
P-68.3.1.3.2 Azozwiązki, R-N=N-R'
P-68.3.1.3.3 Azoksyzwiązki, R-N=N(O)-R'
P-68.3.1.3.4 Diazenokarbohydrazyd, HN=N-CO-NH-NH_2
P-68.3.1.3.5 Formazan, H_2N-N=CH-N=NH
P-68.3.1.3.6 Karbodiazon [bis(diazenylo)metanon], HN=N-CO-N=NH
P-68.3.1.3.7 Izodiazen, $R_2N^+=N^-$

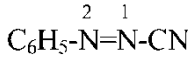
P-68.3.1.3.1 Podstawienie diazenów

Diazen jest modyfikowanym macierzystym wodorkiem pochodzącym od macierzystego wodoru diazanu (patrz P-68.3.1.2.1) i jako taki może być podstawiony przyrostkami i przedrostkami, jak to opisano w P-59.1.10. Przedrostek 'diazenyl' jest wstępnie wybranym przedrostkiem (patrz P-32.1.10).

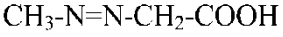
Przykłady:



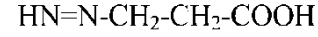
diazenodikarboaldehyd (PIN)



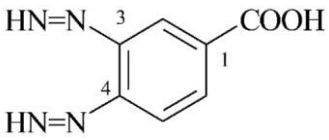
fenylodiazenokarbonitryl (PIN)



kwas (metylodiazenylo)octowy (PIN)



kwas 3-diazenylopropanowy (PIN)



kwas 3,4-bis(diazenylo)benzoesowy (PIN)

P-68.3.1.3.2 Związki azowe, R-N=N-R′

Uwaga: Reguły nazywania związków azowych z wykorzystaniem przedrostka azo były dość skomplikowane w zaleceniach z roku 1979 (odn. 1). Zalecano dwa zestawy reguł, tak zwaną 'starą metodę' (Reguła C-911) i metodę wykorzystywaną przed rokiem 1972 w nomenklaturze indeksów CAS (Reguła C-912). 'Stara metoda' (Reguła C-911, odn. 1) musi zostać całkowicie odrzucona ponieważ niektóre przykłady nie stosują się do podstawowymi reguł nomenklatury organicznej opisanych w roku 1979, zwłaszcza dotyczy to wykorzystania przyrostków. W 1993 roku przyjęto, nowe podejście, wprowadzone przez CAS w 1972 roku, oparte na nazwie macierzystego wodorku 'diazenu' [Metoda (1), poniżej]. Przyniosła ona uproszczenie i racjonalizację i to właśnie ta metoda

jest wykorzystywana do tworzenia preferowanych nazw IUPAC. Jednakże nazwy bazujące na wytycznych C-912 podanych w 1979 roku, również przedstawiono w niniejszym opracowaniu jako alternatywne nazwy stosowane w ogólnej nomenklaturze.

Związki o ogólnym wzorze R-N=N-R′, gdzie R i R′ mogą być takie same lub różne, znane są jako ‘związki’ azowe. Ich nazwy tworzymy na dwa sposoby:

(1) podstawnikowo, z użyciem macierzystego wodorku ‘diazen’, HN=NH;
(2) z wykorzystaniem przedrostka ‘azo’ w tradycyjny sposób (P-68.3.1.3.2.1).

Metoda (1) prowadzi do preferowanych nazw IUPAC.

Związki azowe dzieli się na związki monoazowe, mające pojedynczy układ -N=N-, związki bis(azowe)z dwoma grupami -N=N-, i tak dalej.

P-68.3.1.3.2.1 Symetryczne związki monoazowe, R–N=N–R nazywa się:

(1) podstawiając macierzysty diazen, HN=NH, odpowiednimi podstawnikami;

(2) dodając ‘azo’ do nazwy macierzystego wodorku RH; podstawniki zapisuje się w zwykły sposób za pomocą przedrostków, a dwa macierzyste RH rozróżnia się nieprimowanym i primowanym lokantem. Przyłączenie grupy azowej ma pierwszeństwo do najniższych dostępnych cyfr.

Metoda (1) jest stosowana do tworzenia preferowanych nazw IUPAC.

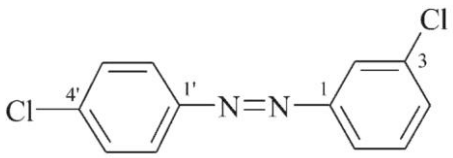
Przykłady:

CH_3-N=N-CH_3

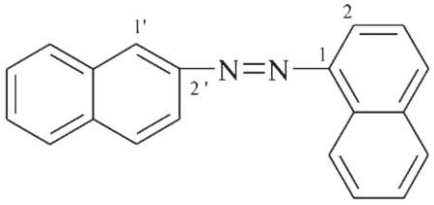
dimetylodiazen (PIN)

C_6H_5-N=N-C_6H_5

difenylodiazen (PIN)



(3-chlorofenylo)(4-chlorofenylo)diazen (PIN)
3,4'-dichloroazobenzen
(pokazano numerację)



(naftalen-1-ylo)(naftalen-2-ylo)diazen (PIN)
1,2′-azonaftalen (pokazano numerację)

P-68.3.1.3.2.2 Niesymetryczne związki monoazowe nazywa się na dwa sposoby:

(1) podstawnikowo, poprzedzając nazwę macierzystego wodorku nazwami odpowiednich podstawników w porządku alfabetycznym;

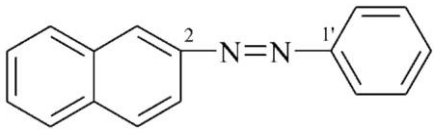
(2) wstawiając ‘azo’ pomiędzy nazwy macierzystych wodorków RH i R'H; główny łańcuch lub starszy pierścień bądź układ pierścieni wymienia się na początku i otrzymuje lokanty ze zwykłymi cyframi, drugi macierzysty wodorek otrzymuje primowane lokanty; jeżeli są wymagane lokanty punktów przyłączenia macierzystych wodorków, są one podawane, odpowiednio, przed albo za przedrostkiem ‘azo’.

Metoda (1) prowadzi do preferowanych nazw IUPAC.

Przykłady:

CH_2=CH-N=N-CH_3

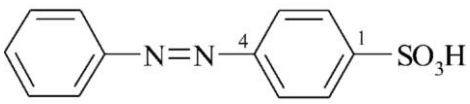
etenylo(metylo)diazen (PIN)
metylo(winylo)diazen
etenoazometan



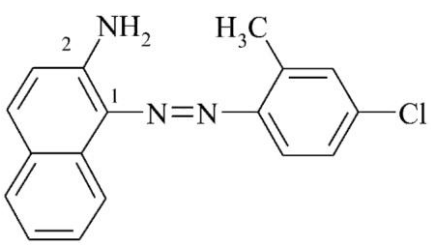
(naftalen-2-ylo)(fenylo)diazen (PIN)
naftaleno-2-azobenzen
(pokazano numerację)

Związki monoazowe o ogólnej strukturze R-N=N-R′, w których R jest podstawione główną grupą charakterystyczną, nazywa się na bazie macierzystego wodorku RH, podstawionego przez organylową grupę ′diazenylową′ R′-N=N-. Jeżeli oba podstawniki R i R′ zawierają tą samą liczbę głównych grup charakterystycznych, preferowana jest nazwa nie podstawnikowa a multiplikacyjna z przedrostkiem 'diazenodiyl' dla -N=N-.

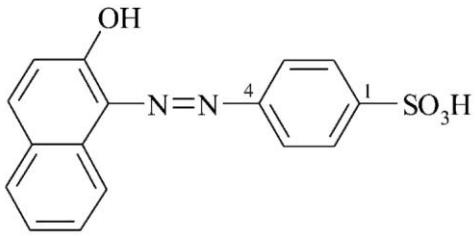
Przykłady:



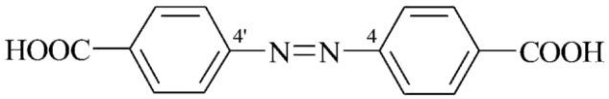
kwas 4-(fenylodiazenylo)benzeno-1-sulfonowy (PIN)



1-[(4-chloro-2-metylofenylo)diazenylo]naftaleno-2-amina (PIN)
[nie 2-aminonafaleno-1-azo-(4′-chloro-2′-metylobenzen) (patrz C-911.2, odn. 1); główna grupa charakterystyczna, amina, musi zostać zapisana jako przyrostek]



kwas 4-[(2-hydroksynaftalen-1-ylo)diazenylo]benzeno-1-sulfonowy (PIN)
kwas 4-[(2-hydroksy-1-naftylo)azo]benzeno-1-sulfonowy



kwas 4,4′-diazenodiylodibenzoesowy (PIN)
(zwyczajowo kwas 4,4′-azodibenzoesowy)

P-3.1.3.2.3 Bis(azo)związki i bardziej złożone analogi, pod nieobecność charakterystycznych grup mających pierwszeństwo do wymieniania jako przyrostki, nazywa się:

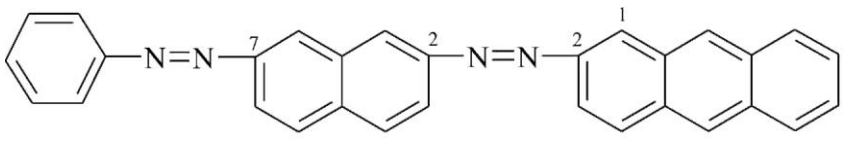
(1) na bazie ‘diazenu’, jak opisano w P-68.3.1.3.2.1 powyżej, pierwszy wymieniany podstawnik wybiera się na zasadzie porządku alfanumerycznego;

(2) z użyciem przedrostka ‘azo’, jak opisano w P-68.3.1.3.2.1;

(3) z użyciem przedrostka ‘azo’ i, po wybraniu głównego macierzystego wodorku, podstawiając drugi składnik jako grupę ‘organyloazo’.

Metoda (1) generuje preferowane nazwy IUPAC.

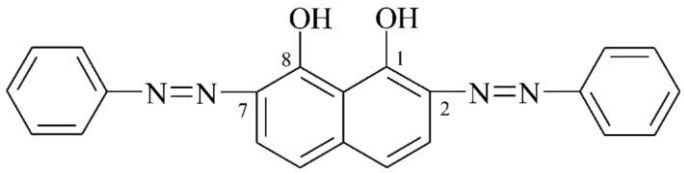
Przykład:



(1) [7-(antracen-2-ylodiazenylo)naftalen-2-ylo]fenylodiazen (PIN)
{nie (antracen-2-ylo)[(7-fenylodiazenylo)naftalen-2-ylo]diazen; każdy główny podstawnik ma ten sam lokant, to znaczy brak lokantu, tak więc ‘antracenylodiazenyl’ jest alfabetycznie preferowany względem ‘antracenylofenylo’.
(2) antraceno-2-azo-2′-naftylo-7′-azobenzen
(3) 2-{[7-(fenyloazo)naftalen-2-ylo]azo}antracen

Jeżeli w związku są obecne grupy charakterystyczne mające pierwszeństwo do wymieniania jako przyrostki, stosuje się zwykłą operacje podstawienia bazującą na pierwszeństwie przyrostków. Nazwy tworzone z wykorzystaniem przedrostka ‘diazenylo’ są preferowane w stosunku do przedrostka ‘azo’ dla preferowanych nazw IUPAC.

Przykład:



2,7-bis(fenylodiazenylo)naftaleno-1,8-diol (PIN)
2,7-bis(fenyloazo)naftaleno-1,8-diol

P-68.3.1.3.3 Związki azoksy, R-N=N(O)-R′

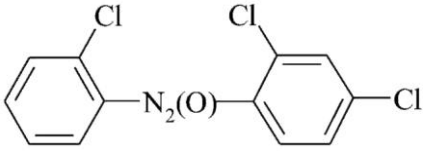
P-68.3.1.3.3.1 *N*-Oksydy (*N*-tlenki) związków azo o ogólnym wzorze R-N_2(O)-R′ (gdzie R = R′ lub R ≠ R′) są ogólnie znane jako związki azoksy. Ich nomenklatura została zrewidowana w roku 1993 (odn. 2) i jest przedstawiona w niniejszych wytycznych. Związki azoksy nazywa się na dwa różne sposoby:

(1) dodając termin ‘oksyd’ do nazwy odpowiedniego związku azowego, poprzedzony lokantem 1 lub 2;
(2) w tradycyjny sposób, zamieniając przedrostek ‘azo’ na ‘azoksy’ i zastosowanie lokantów *NNO* oraz *ONN* dla wskazania macierzystego wodorku związanego z grupą =N(O). W ogólnym wzorze R-N(O)N-R′, zapis *NNO* wskazuje, że atom tlenu jest połączony z atomem azotu związanym z grupą R′. Symbol *ONN* określa odwrotne położenie atomu tlenu, czyli jego związanie z atomem azotu obok grupy R. Gdy nie jest możliwe określenie położenia atomu tlenu stosuje się symbol *NON*.

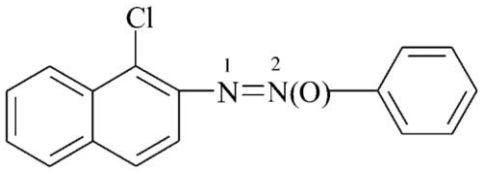
Metoda (1) prowadzi do preferowanych nazw IUPAC. Związki azoksy możemy również nazwać z wykorzystaniem konwencji λ oraz jako zwitterjony.

Przykłady:

C_6H_5-N=N(O)-C_6H_5
(1) oksyd difenylodiazenu (PIN)
(2) azoksybenzen
1-okso-1,2-difenylo-1λ^5-diazen (patrz P-74.2.2.1.4)
(difenylodiazeniumylo)oksydanid (patrz P-74.2.2.1.4)



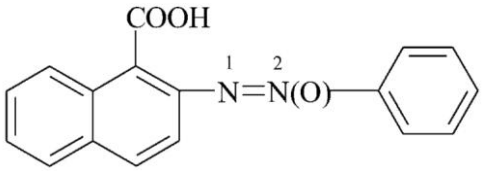
oksyd (2-chlorofenylo)(2,4-dichlorofenylo)diazenu (PIN)
(brak lokantu oznacza, że położenie atomu tlenu jest nieznane)
2,2′,4-trichloroazoksybenzen



2-oksyd 1-(1-chloronaftalen-2-ylo)-2-fenylodiazenu (PIN)
1-chloro-2-(fenylo-*ONN*-azoksy)naftalen

P-68.3.1.3.3.2 Związki azoksy, zgodnie z ogólnym starszeństwem zwitterjonów nad przyrostkami wskazującymi grupy charakterystyczne, raczej nazywa się jako pochodne oksydu diazenu chyba, że w cząsteczce znajduje się inna grupa rodnikowa lub jonowa, której przypisze się pierwszeństwo. W ogólnej nomenklaturze, tradycyjna metoda nazywania związków azoksy została utrzymana. Związki azoksy o ogólnym wzorze R-N=N(O)-R′ lub R′-N-N(O)-R, w których grupa R jest podstawiona główną charakterystyczną, nazywa się na bazie macierzystego wodorku, RH, podstawionego grupą R′-azoksy, w której pozycję atomu tlenu wskazuje się przedrostkami, odpowiednio, *NNO*-, *ONN*- lub *NON*.

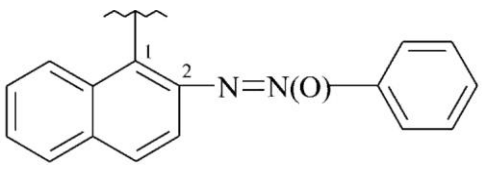
Przykład:



2-oksyd 1-(1-karboksynaftalen-2-ylo)-2-fenylodiazenu (PIN)
kwas 2-(fenylo-*ONN*-azoksy)naftaleno-1-karboksylowy
[nie kwas 2-(fenylo-*ONN*-azoksy)-1-naftoesowy; kwas naftoesowy nie może mieć podstawników]

Kiedy związek azoksy musi być wskazany przedrostkiem, preferowana jest nomenklatura podstawnikowa z wykorzystaniem konwencji λ (zob. P-14.1).

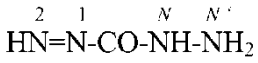
Przykład:



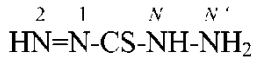
2-(2-fenyl-2-okso-2λ^5-diazenylo)naftalen-1-yl (preferowany przedrostek)
2-(2-oksydo-2-fenylodiazen-2-ium-1-ylo)naftalen-1-yl

P-68.3.1.3.4 Diazenokarbohydrazydy, HN=N-CO-NH-NH_2

Hydrazydy ‘kwasu diazenokarboksylowego’, HN=N-CO-NH-NH_2, systematycznie nazywa się ‘diazenokarbohydrazydami’; jest to preferowana nazwa IUPAC. Nazwa ‘karbazon’ nie jest zalecana. Chalkogenowe analogi nazywa się z wykorzystaniem wrostków i przedrostków ‘tio’, ‘seleno’ i ‘telluro’.



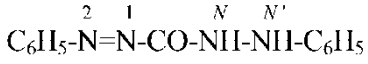
diazenokarbohydrazyd (PIN)



diazenokarbotiohydrazyd (PIN)

Uwaga: Cyfrowe lokanty używane w nazwie ′karbazon′, obecnie zarzuconej, nie są przeniesione do preferowanej nazwy IUPAC ′diazenokarbohydrazyd′.

Przykłady:



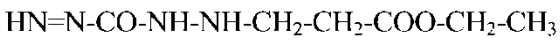
N′,2-difenylodiazenokarbohydrazyd (PIN)

N′,2-difenylodiazenokarbotiohydrazyd (PIN)

Jako przedrostek, grupa -HN-NH-CO-N=NH nazywana jest ‘2-(diazenokarbonylo)hydrazyn-1-yl’ lub ‘diazenokarbohydrazydo’ (preferowany przedrostek).

Nazwa ‘karbazono’ nie jest zalecana. Grupa H_2N-NH-CO-N=NH- nazywana jest ‘(hydrazynokarbonylo)diazenyl’.

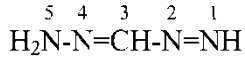
Przykład:



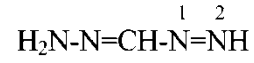
3-[2-(diazenokarbonylo)hydrazyn-1-ylo]propanian etylu (PIN)

P-68.3.1.3.5 Formazan, H_2N-N=CH-N=NH

Hydrazon diazenokarboaldehydu, H_2N-N=CH-N=NH ma zachowaną nazwę ‘formazan’, która również jest preferowaną nazwą IUPAC; numerowany jest w specjalny sposób. Związek ten można również nazwać podstawnikowo jako pochodną macierzystego wodorku ‘diazenu’.



formazan (PIN)

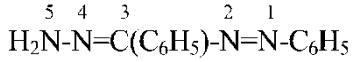


(hydrazylidenometylo)diazen

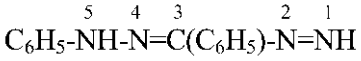
P-68.3.1.3.5.1 Pochodne formazanu

Preferowane nazwy dla pochodnych formazanu tworzy się systematycznie kiedy obecne są jedynie przedrostki lub kiedy główna grupa charakterystyczna dołączona jest bezpośrednio do struktury formazanu. W innym przepadku, funkcjonalizowana macierz formazanu musi zostać przedstawione zgodnie z regułami starszeństwa stosowanymi dla tworzenia nazw związków (zob. P-59.1.10).

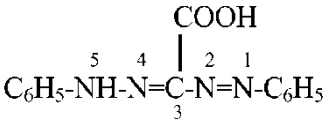
Przykład:



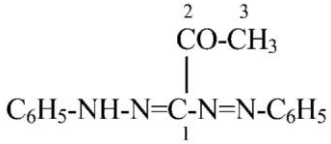
1,3-difenyloformazan (PIN)
[hydrazynylideno(fenylo)metylo]fenylodiazen
hydrazon fenylo(fenylodiazenylo)metanonu



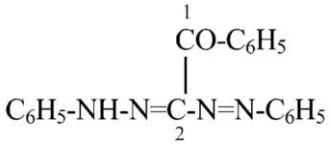
3,5-difenyloformazan (PIN)
[fenylo(fenylohydrazylideno)metylo]diazen
2-fenylohydrazon fenylo(diazenylo)metanonu



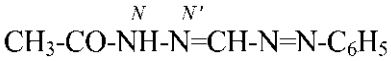
kwas 1,5-difenyloformazano-3-karboksylowy (PIN)
kwas (fenylodiazenylo)(fenylohydrazylideno)octowy



1-(fenylodiazenylo)-1-(fenylohydrazylideno)propan-2-on (PIN)
3-acetylo-1,5-difenyloformazan



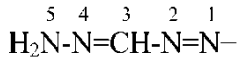
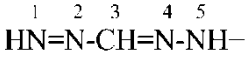
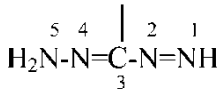
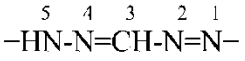
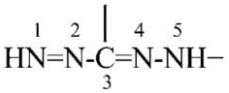
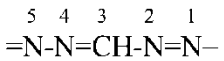
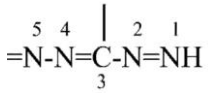
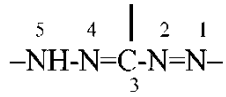
1-fenylo-2-(fenylodiazenylo)-2-(fenylohydrazylideno)etan-1-on (PIN)
3-benzoilo-1,5-difenyloformazan



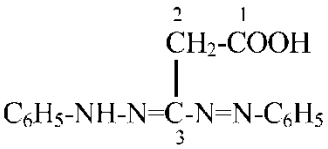
N′-[(fenylodiazenylo)metylideno]acetohydrazyd (PIN)

P-68.3.1.3.5.2 Przedrostki pochodzące od formazanu w nomenklaturze podstawnikowej

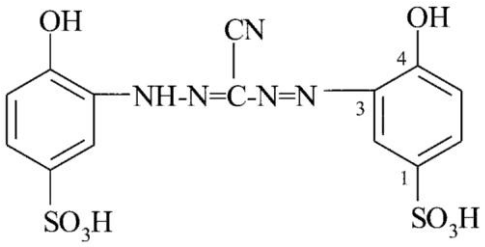
Podstawniki pochodzące od formazanu są następujące; zachowane nazwy prowadzą do preferowanych przedrostków IUPAC.

	Preferowany przedrostek	Systematyczny przedrostek
	formazan-1-yl	(hydrazylidenometylo)diazenyl
	formazan-5-yl	diazenylometylideno)hydrazynyl
	formazan-3-yl	diazenylo(hydrazynylideno)metyl
	formazan-1,5-diyl	
	formazan-3,5-diyl	
	formazan-1-yl-5-yliden	
	formazan-3-yl-5-yliden	
	formazan-1-yl-5-yliden	

Przykłady:



kwas 3-(fenylodiazenylo)-3-(fenylohydrazynylideno)propionowy (PIN; kwas propionowy jest preferowany względem kwasu octowego)
kwas (1,5-difenyloformazan-3-ylo)octowy



kwas 3,3′-(3-cyjanoformazan-1,5-diylo)bis(4-hydroksybenzeno-1-sulfonowy) (PIN)
kwas 3-(2-{cyjano-[(2-hydroksy-5-sulfofenylo)diazenylo]metylideno}hydrazynylo)-4-hydroksybenzeno-1-sulfonowy

{nie kwas 3-(2-{cyjano-[(2-hydroksy-5-sulfofenylo)hydrazynylideno]metylo}diazenylo)-4-hydroksybenzeno-1-sulfonowy (‘cyjanohydroksysulfofenylodiazenylo…’ jest niżej alfanumerycznie niż ‘cyjanohydroksysulfofenylohydrazynylideno…’)

P-68.3.1.3.6 Karbodiazon [bis(diazenylo)metanon], HN=N-CO-N=NH

Związek HN=N-CO-N=NH nazywany jest systematycznie bis(diazenylo)metanon; jego pochodne hydrokarbylowe nazywa się podstawnikowo. Takie nazwy są preferowanymi nazwami IUPAC ponad te z zachowaną nazwą ‘karbodiazon’, które mogą być używane w ogólnej nomenklaturze z pełnym podstawieniem zgodnie ze specjalną numeracją. Nazwa ‘bis(diazenylo)metanon’ jest po prostu preferowana dla 1,1′-karbonylobis(diazenu), ponieważ keton wyrażony przyrostkiem ‘on’ jest starszy w stosunku do macierzystej struktury ‘diazan’ lub ‘diazen’ (patrz P-41).

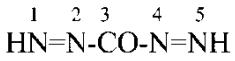
Analogi chalkogenowe bis(diazenylo)metanonu także nazywa się systematycznie tak jak odpowiednio bis(diazenylo)metanotion, -selenon i –telluron. Przedrostki tio, seleno i telluro są używane z nazwą karbadiazon w ogólnej nomenklaturze.

Lokanty cyfrowe nie są już używane dla karbodiazonu lub jego analogów chalkogenowych.

Przykłady:

HN=N-CO-N=NH

bis(diazenylo)metanon (PIN)
[nie 1,1′-karbonylobis(diazen)]



karbodiazon

HN=N-CS-N=NH

bis(diazenylo)metanotion (PIN)
tiokarbodiazon

HN=N-CO-N=N–

(diazenokarbonylo)diazenyl
(preferowany przedrostek)

C_6H_5-N=N-CO-N=N-C_6H_5

bis(fenylodiazenylo)metanon (PIN)
1,5-difenylokarbodiazon

P-68.3.1.3.7 Izodiazeny, $R_2N^+=N^-$

Związki o ogólnej strukturze $R_2N\text{-}N\mathbf{:} \leftrightarrow R_2N^+=N^-$ ogólnie zwane ‘izodiazenami’ nazywa się podstawnikowo na bazie macierzystego rodnika ‘hydrazynylidenu’, $H_2N\text{-}N\mathbf{:}$. Metoda ta prowadzi do preferowanych nazw IUPAC zamiast nazw opartych na macierzystym wodorku ‘izodiazen’.

Przykład:

$(CH_3)_2N\text{-}N\mathbf{:}$

dimetylohydrazynyliden (PIN)
dimetyloizodiazen

P-68.3.1.4 Poliazany

P-68.3.1.4.1 Acykliczne poliazany są nasyconymi łańcuchami atomów azotu; hydrazyna jest zachowaną nazwą i preferowaną nazwą IUPAC dla diazanu $H_2N\text{-}NH_2$. Nazwy tworzy się poprzedzając nazwę mononuklearnego macierzystego wodorku ‘azan’ odpowiednim liczbowym przedrostkiem i numerując w ten sam sposób jak węglowodory. Macierzyste wodorki są wstępnie wybranymi nazwami (patrz P-12.2). Końcówka ‘a’ liczbowego przedrostka nie jest usuwana przed słowem ‘azan’.

Przykłady:

$\overset{1}{CH_3}\text{-}\overset{2}{NH}\text{-}\overset{3}{NH}\text{-}NH_2$

1-metylotriazan (PIN)

$\overset{1}{CH_3}\text{-}\overset{2}{NH}\text{-}\overset{3}{N}(CH_3)\text{-}\overset{4}{NH}\text{-}NH_2$

1,2-dimetylotetraazan (PIN)

Odpowiednie przedrostki nazywa się zgodnie z ogólną metodą opisaną w P-29. Tradycyjne nazwy ‘triazano’ i ‘triazeno’, teraz jako epitriazano i epitriazeno (patrz P-25.4.2.1.4), są nazwami mostków w nazwach mostkowych pierścieni skondensowanych i nie mogą być używane jako nazwy podstawników.

Tworzenie systematycznych nazw przedrostków, np. triazan-1-yl, itp., jak opisano w P-29, należy uznać za zmianę, nawet jeżeli nazwy triazano, tetrazano, itd. wcześniej stosowane dla mostków w nazywaniu układów mostkowych pierścieni skondensowanych, nie są już używane jako takie i zostały zastąpione nazwami ‘epitriazano’, itd. (patrz P-25.4.2.1.4).

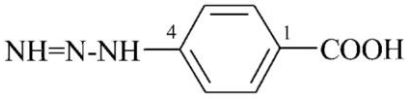
$\overset{3}{H_2}N\text{-}\overset{2}{NH}\text{-}\overset{1}{NH}\text{–}$

triazan-1-ylo-
(wstępnie wybrany przedrostek)
(nie triazano)

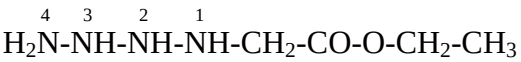
$\overset{3}{HN}=\overset{2}{N}\text{-}\overset{1}{NH}\text{–}$

triaz-2-en-1-ylo-
(wstępnie wybrany przedrostek)
(nie triaz-2-eno)

Przykłady:



kwas 4-(triaz-2-en-1-ylo)benzoesowy (PIN)
(nie kwas 4-triazenobenzoesowy)

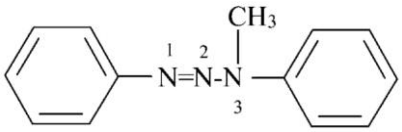


(tetrazan-1-ylo)octan etylu (PIN)
(nie tetrazanooctan etylu)

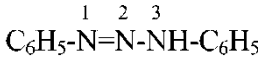
P-68.3.1.4.2 Związki diazoaminowe

Związki mające strukturę R-N=N-NR_2 są znane jako ‘związki diazoaminowe’, kiedy ten sam podstawnik jest ulokowana na obu końcach łańcucha. Nazywa się je podstawnikowo na bazie nazwy macierzystego wodorku ‘triazen’. Przedrostek ‘diazoamino’ dla grupy –N=NH-NH nie jest już zalecany.

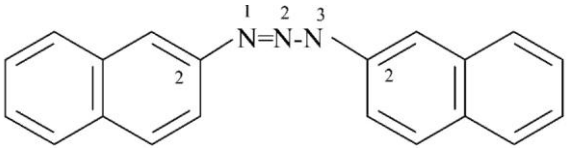
Przykłady:



3-metylo-1,3-difenylotriaz-1-en (PIN)
(poprzednio *N*-metylodiazoaminobenzen)



1,3-difenylotriaz-1-en (PIN)
(poprzednio diazoaminobenzen)



1,3-di(naftalen-2-ylo)triaz-1-en (PIN)
(poprzednio 2,2′-diazoaminonaftalen)

P-68.3.2 Związki fosforu, arsenu i antymonu

P-68.3.2.1 Ogólna metodologia

Preferowane nazwy acyklicznych związków fosforu, arsenu i antymonu są nazwami klasowo-funkcyjnymi (patrz P-67) pochodzącymi od mononuklearnych i polinuklearnych kwasów takich jak kwas fosforowy H_3PO_4, kwas arsonawy $HAs(OH)_2$, kwas stybinowy $H_2Sb(O)(OH)$ i kwas difosfonowy HO-HP(O)-O-P(O)H-OH, zamiast nazw podstawnikowych opartych na macierzystych wodorkach.

Innymi preferowanymi nazwami acyklicznych i cyklicznych związków są nazwy podstawnikowe zgodne ze starszeństwem klas (patrz P-41).

Ten podrozdział zawiera opis nomenklatury klasowo- funkcyjnej i nomenklatury podstawnikowej.

P-68.3.2.2 Macierzyste wodorki
P-68.3.2.3 Nomenklatura podstawnikowa

P-68.3.2.2 Macierzyste wodorki

Macierzyste wodorki tworzy się metodami opisanymi w rozdziale P-2. Są one mononuklearnymi, acyklicznymi polinuklearnymi i cyklicznymi układami pierścieni i są wstępnie wybranymi nazwami (patrz P-12.2). Konwencja λ używana jest celem oznaczania pentawalencyjnych atomów fosforu i arsenu. Zachowanymi nazwami do użycia jedynie w ogólnej nomenklaturze są fosfina, fosforan, arsyna, arsoran, stybina i styboran.

Preferowane nazwy wybrano tak jak wskazano w rozdziale P-2.

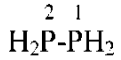
Przykłady:

PH_3

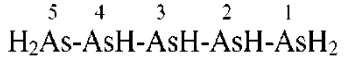
fosfan
(wstępnie wybrana nazwa)
fosfina

AsH_5

λ^5-arsan
(wstępnie wybrana nazwa)
arsoran



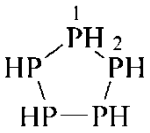
$H_2P\text{-}PH_2$

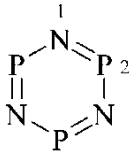


$H_2As\text{-}AsH\text{-}AsH\text{-}AsH\text{-}AsH_2$

difosfan
(wstępnie wybrana nazwa)
difosfina

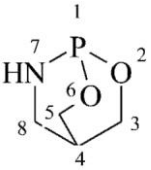
pentaarsan
(wstępnie wybrana nazwa)

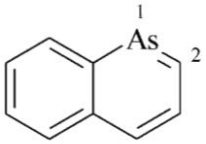




pentafosfolan
(wstępnie wybrana nazwa)
cyklopentafosfan

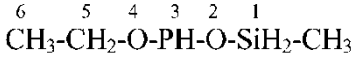
1,3,5,2,4,6-triazatrifosfinin
(wstępnie wybrana nazwa)
cyklotrifosfazen





2,6-dioksa-7-aza-1-fosfabicyklo[2.2.2]oktan (PIN)

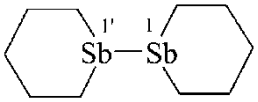
arsynolin (PIN)



$CH_3\text{-}CH_2\text{-}O\text{-}PH\text{-}O\text{-}SiH_2\text{-}CH_3$

fosfinian etylu metylosililu (PIN)

Uwaga: Nazwa zamienna szkieletu, 3,5-dioksa-2-sila-4-fosfaheptan, nie może być użyta jako PIN, ponieważ grupa –O-P-O jest częścią estru i jest wyrażona jako główna grupa charakterystyczna, a zatem pozostaje tylko jedna heterojednostka –O– w strukturze (patrz P-51.4.1).



1,1′-bistybinan (PIN)

P-68.3.2.3 Nomenklatura podstawnikowa

Związki nie nazywane zgodnie z poprzednią sekcją, P-68.3.2.2, nazywa się podstawnikowo na bazie acyklicznych i cyklicznych macierzystych wodorków, używając przyrostki i przedrostki do określania charakterystycznych grup.

P-68.3.2.3.1 Nomenklatura podstawnikowa, tryb przyrostka

Przyrostki używa się do wskazywania charakterystycznych grup obecnych jako główne grupy z wyjątkiem kwasów mających zachowane nazwy oraz ich pochodnych, tak jak opisano w P-67. Ta metoda tworzy preferowane nazwy IUPAC, ponad te tworzone za pomocą nomenklatury klasowo-funkcyjnej, gdzie =O, =S, =Se, =Te, =NH są określone nazwami klas: oksyd, sulfid, selenid, telluryd i imid dodanymi do nazwy macierzystego wodorku.

Przykłady:

H_2P-COOH

kwas fosfanokarboksylowy (PIN)

H_2P-CO-NH_2

fosfanokarboksyamid (PIN)

C_6H_5-P=O

fenylofosfanon (PIN)
[nie okso(fenylo)fosfan]

$(C_6H_5)_3P$=O

trifenylo-λ^5-fosfanon (PIN)
oksyd trifenylofosfanu
(nie oksotrifenylo- λ^5-fosfan)

HP=N-CH_3

N-metylofosfanoimina (PIN)
[nie (metyloimino)fosfan]

$(CH_3)_3$As=Te

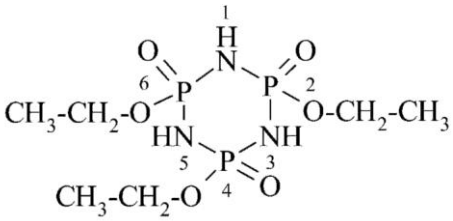
trimetylo- λ^5-arsanotellon (PIN)
telluryd trimetyloarsanu

C_6H_5-As=S

fenyloarsanotion (PIN)
[nie fenylo(sulfanylideno)arsan]

$(CH_3)_3$As=NH

trimetylo- λ^5-arsanimina (PIN)
imid trimetyloarsanu



2,4,6-trietoksy-1,3,5,2λ^5,4λ^5,6λ^5-triazatrifosfinan-2,4,6-trion (PIN)

P-68.3.2.3.2 Nomenklatura podstawnikowa, tryb przedrostka

Starszeństwo klas musi być stosowane w następującym porządku: klasy wyrażone przez przyrostki, następnie klasy w porządku klas heteroatomu, i.e. N > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al > Ga > In > Tl > O > S > Se > i Te.

P-68.3.2.3.2.1 Podstawienie fosfanów, arsanów i stibanów przez grupy organylowe

Grupy alkilowe, arylowe itd. oraz grupy pochodzące od macierzystych wodorków zawierających atomy O, S, Se i Te są zawsze określone przedrostkami. Halogenków i pseudohalogenków połączonych bezpośrednio z atomami P, As lub Sb, nie wskazuje się przedrostkami, ponieważ zamiana funkcji macierzystych kwasów mających zachowane nazwy ma pierwszeństwo w nazywaniu ich jako halogenki lub pseudohalogenki kwasowe. (patrz P-67.1.2.5.1).

Przykłady:

$(C_6H_5)_3P$

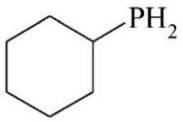
trifenylofosfan (PIN)
trifenylofosfina

CH_3-CH_2-AsH_2

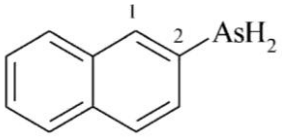
etyloarsan (PIN)
etyloarsyna

$P(OCH_3)_5$

pentametoksy-λ^5-fosfan (PIN)



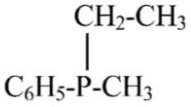
cykloheksylofosfan (PIN)
cykloheksylofosfina



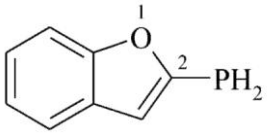
(naftalen-2-ylo)arsan (PIN)
(naftalen-2-ylo)arsyna
2-naftyloarsan

$ClCH_2$-CH_2-AsH-CHCl-CH_3

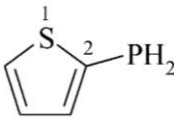
(1-chloroetylo)(2-chloroetylo)arsan (PIN)
(1-chloroetylo)(2-chloroetylo)arsyna



etylo(metylo)fenylofosfan (PIN)
etylo(metylo)fenylofosfina

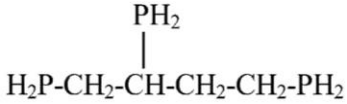


(1-benzofuran-2-ylo)fosfan (PIN)
(1-benzofuran-2-ylo)fosfina

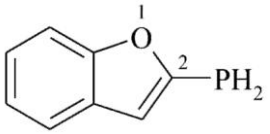


(tiofen-2-ylo)fosfan (PIN)
(tiofen-2-ylo)fosfina

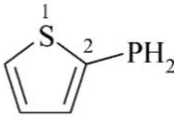
(etano-1,2-diylo)bis(dimetylofosfan) (PIN)
(etano-1,2-diylo)bis(dimetylofosfina)



(butano-1,2,4-triylo)tris(fosfan) (PIN)
(butano-1,2,4-triylo)tris(fosfina)



(dibenzo[*b*,*d*]furano-3,7-diylo)bis(fosfan) (PIN)
(dibenzofurano-3,7-diylo)bis(fosfina)



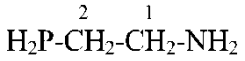
(1,2-fenyleno)bis(arsan) (PIN)
(1,2-fenyleno)bis(arsyna)

P-68.3.2.3.2.2 Fosfany, arsany i stybany wyrażone jako podstawniki

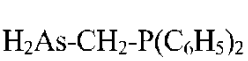
Podstawniki tworzy się ogólną metodą opisaną w P-29, i.e. przez dodanie przyrostków ‘yl’, ‘yliden’ i ‘ylidyn’ do nazwy macierzystego wodorku. Gdy jest to wymagane, stosowana jest kolejność klas, tak jak wskazano w P-41. Tradycyjne nazwy fosfino, arsyno i stibino mogą być używane w ogólnej nomenklaturze.

$-PH_2$	-As=
fosfanyl (wstępnie wybrany przedrostek) fosfino	arsanylyliden (wstępnie wybrany przedrostek)
$-H_2P-PH_2-$	-As<
difosfano-1,2-diyl (wstępnie wybrany przedrostek)	arsanotriyl (wstępnie wybrany przedrostek)
$-AsH_2$	$-SbH_2$
arsanyl (wstępnie wybrany przedrostek) arsyno	stybanyl (wstępnie wybranyprzedrostek) stybino
$-SbH-SbH_2$	distybanyl (wstępnie wybrany przedrostek)

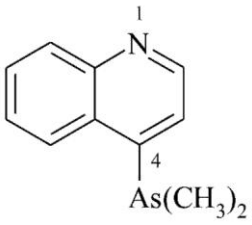
Przykłady:



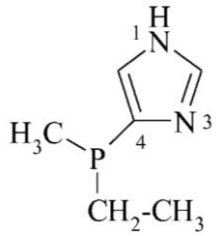
2-fosfanyloetano-1-amina (PIN)
2-fosfinoetano-1-amina



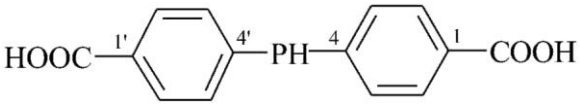
(arsanylometylo)difenylofosfan (PIN)
(arsynometylo)difenylofosfan



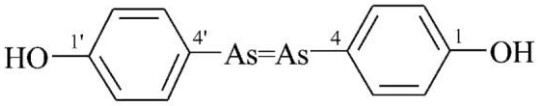
4-(dimetyloarsanylo)chinolina (PIN)
4-(dimetyloarsyno)chinolina



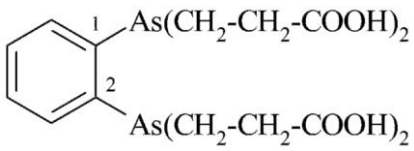
4-[etylo(metylo)fosfanylo]-1*H*-imidazol (PIN)
4-[etylo(metylo)fosfino]-1*H*-imidazol



kwas 4,4′-fosfanodiylodibenzoesowy (PIN)

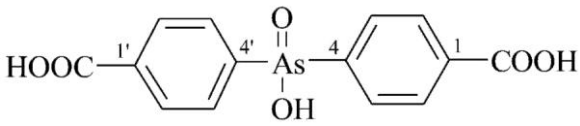


4,4′-diarsenodiylodifenol (PIN)

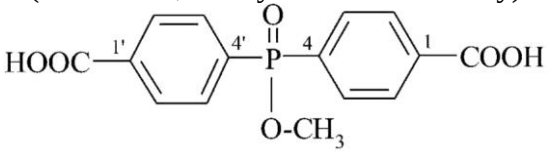


kwas 3,3′,3″,3‴-[1,2-fenylenobis(arsanotriylo)tetrapropionowy (PIN)

kwas arsonooctowy (PIN)



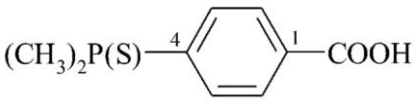
kwas 4,4′-(hydroksyarsorylo)dibenzoesowy (PIN)
(nie kwas 4,4′-arsynikodibenzoesowy)



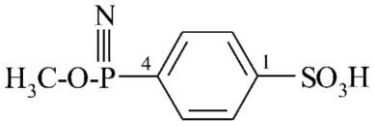
kwas 4,4′-(metoksyfosforylo)dibenzoesowy (PIN)

$Cl_2P(O)\text{-}CH_2\text{-}CO\text{-}Cl$ chlorek fosforodichlorydoiloacetylu (PIN)
chlorek (dichlorofosforylo)acetylu

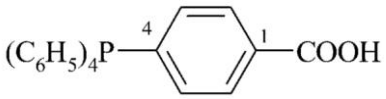
$(CH_3O)_2P(=NH)\text{-}CH_2\text{-}CO\text{-}O\text{-}CH_3$ (*P*,*P*-dimetoksyfosforoimidoilo)octan metylu (PIN)



kwas 4-(dimetylofosfinotioilo)benzoesowy (PIN)



kwas 4-(metoksyfosforonitrydoilo)benzeno-1-sulfonowy (PIN)



kwas 4-(tetrafenylo-λ^5-fosfanylo)benzoesowy (PIN)
kwas 4-(tetrafenylofosforanylo)benzoesowy

(4-stibanylofenylo)arsan (PIN)
(4-stibinofenylo)arsyna

P-68.3.3 Związki bizmutu

Związki bizmutu nazywa się podstawnikowo na bazie macierzystych wodorków nazwanych zgodnie z regułami opisanymi w rozdziale P-2. Przyrostki i przedrostki używa się jak wskazano dla nomenklatury podstawnikowej. Nie ma kwasów mających zachowane nazwy i podlegających nomenklaturze klasowo-funkcyjnej. Nomenklatura podstawnikowa jest preferowana wzgledem nomenklatury funkcyjnej do opisywania oksydów, sulfidów, selenidów, tellurydów i imidów. Preferowane i wstępnie wybrane nazwy wybiera się tak jak nazwy macierzyste i przedrostki dla P, As i Sb.

BiH_3

bizmutan (wstępnie wybrana nazwa)
bizmutyna

BiH_5

λ^5-bizmutan (nazwa wstępnie wybrana)
bizmutoran

$H_2Bi\text{-}BiH_2$

dibizmutan

$H_2Bi\text{-}$

bizmutanyl

(wstępnie wybrana nazwa) (wstępnie wybrany przedrostek)
bizmutyno

$H_3Bi=$ -HBi-BiH-

λ^5-bizmutanyliden dibizmutano-1,2-diyl
(wstępnie wybrany przedrostek) (wstępnie wybrany przedrostek)

Przykłady:

$Bi(CH=CH_2)_3$ $Bi(CH_3)_3$

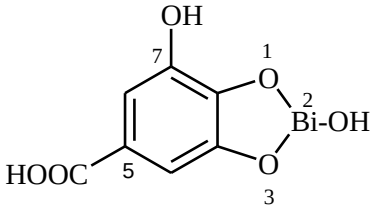
trietenylobizmutan (PIN) trimetylobizmutan (PIN)
triwinylobizmutyna trimetylobizmutyna

$(C_6H_5)_3Bi=O$ $(C_6H_5)_3Bi=NH$

trifenylo-λ^5-bizmutanon (PIN) trifenylo-λ^5-bizmutanoimina (PIN)
oksyd trifenylobizmutanu imid trifenylobizmutanu

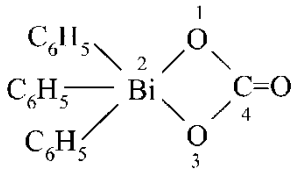
$\overset{5}{O}=\overset{4}{Bi}-\overset{3}{O}-\overset{2}{C}\overset{1}{O}-O-Bi=O$

karbonian bis(oksobizmutanylu) (PIN)
2,4-dioksa-1,5-dibizmapentano-1,3,5-trion

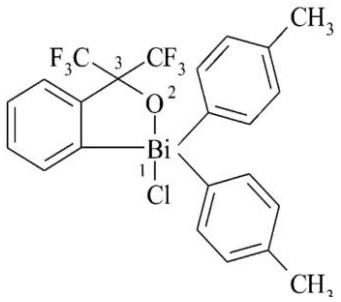


kwas 2,7-dihydroksy-2*H*-1,3,2-benzodioksabizmolo-5-karboksylowy (PIN)

$(C_6H_5)_3BiCl_2$ dichloro(trifenylo)-λ^5-bizmutan (PIN)
dichloro(trifenylo)bizmutoran



2,2,2-trifenylo-1,3,2λ^5-dioksabizmetan-4-on (PIN)



1-chloro-1,1-bis(4-metylofenylo)-3,3-bis(trifluorometylo)-1,3-dihydro-2,1λ^5-benzoksabizmol (PIN)

P-68.4 NOMENKLATURA ZWIĄZKÓW PIERWIASTKÓW GRUPY 16

P-68.4.0 Wprowadzenie
P-68.4.1 Trzy lub więcej homogenicznych sąsiadujących atomów chalkogenu
P-68.4.2 Trzy lub więcej heterogenicznych sąsiadujących atomów chalkogenu
P-68.4.3 Chalkogenowe macierzyste wodorki z niestandardową wiązalnością

P-68.4.0 Wprowadzenie

Nomenklatura związków zawierających atomy chalkogenu zależy od liczby i rodzaju obecnych atomów chalkogenu. Kiedy jeden lub dwa sąsiadujące atomy chalkogenu są obecne, atomów chalkogenu nie używa się jako macierzystych wodorków, z wyjątkiem sulfonów i disulfonów, kiedy można je wyrazić tak jak opisano w poprzednich sekcjach. Związki hydroksylowe, etery, peroksole, peroksydy i ich analogi chalkogenowe opisano w P-63. Niemniej jednak, kiedy występują trzy lub więcej sąsiadujących identycznych atomów chalkogenu, to te atomy chalgonenu zawsze traktuje się jako macierzyste wodorki, w normalny sposób.

Ten typ nomenklatury obejmuje także sulfotlenki i sulfony (patrz P-63.6).

P-68.4.1 Trzy lub więcej homogenicznych sąsiadujących atomów chalkogenu

P-68.4.1.1 Związki z trzema lub więcej sąsiadującymi identycznymi atomami chalkogenu traktuje się jako macierzyste wodorki w nomenklaturze podstawnikowej.

Przykłady:

HO-O-OH	CH_3-S-S-SH
trioksydan (wstępnie wybrana nazwa)	metylotrisulfan (PIN)
CH_3-O-O-O-CH_3	CH_3-S-S-S-CH_3
dimetylotrioksydan (PIN) trioksyd dimetylu	dimetylotrisulfan (PIN) trisulfid dimetylu

C_6H_5-Se-Se-Se-CH_3
metylo(fenylo)triselan (PIN)
triselenid fenylu metylu

C_6H_5-Se-Se-Se-C_6H_5
difenylotriselan (PIN)
triselenid difenylu
(nie triselanodiylodibenzen)

HO-SO_2-Te-Te-Te-SO_2-OH
kwas tritellanodisulfonowy
(wstępnie wybrana nazwa)
kwas tritelluropentationowy
(nazwa tradycyjna)

HO-SO_2-S-S-S-SO_2-OH
kwas trisulfanodisulfonowy
(wstępnie wybrana nazwa)
kwas pentationowy
(nazwa tradycyjna)

CH_3-SeSeSe-O-SH
metylotriselano-*OS*-tioperoksol (PIN)
tiohydroperoksyd *O*-(metylotriselanylu)

HO-SO_2-Te-Te-Te-SO_2-OH
kwas tritellanodisulfonowy
(wstępnie wybrana nazwa)
diselenohydroperoksyd tritellurylu

HO-SO_2-S-S-S-SO_2-OH
fenylotrisulfanol (PIN)

CH_3-TeTeTeTe-SH
metylotetratellanotiol (PIN)

P-68.4.1.2 Nomenklaturę multiplikacyjną używa się jeżeli spełnione są warunki do jej stosowania Centralne podstawniki wywodzi się z ogólnej metody generowania diwalencyjnych podstawników (patrz P-29.3.2.2).

-O-O-O-
trioksydanodiyl
(wstępnie wybrany przedrostek)
trioksy

-S-S-S-
trisulfanodiyl
(wstępnie wybrany przedrostek)
tritio

-Se-Se-Se-Se-
tetraselanodiyl
(wstępnie wybrany przedrostek)
tetraseleno

Przykłady:

HS-S-S-CH_2-S-S-SH 1,1′-metylenobis(trisulfan) (PIN)

kwas 4,4′-triselanodiylodibenzoesowy (PIN)
kwas 4,4′-triselenodibenzoesowy

P-68.4.1.3 Jeżeli łańcuch identycznych atomów chalkogenu jest zakończony jedną lub dwiema grupami acylowymi, związek nazywa się jako pseudoketon (patrz P-64.1.2.1 i P-65.7.5.1) na bazie preferowanego składnika karbonylowego. Nomenklaturę multiplikacyjną używa się, jeżeli spełnione są zasady jej stosowania

Przykłady:

CH_3-CH_2-CO-O-O-OH

1-trioksydanylopropan-1-on (PIN)
1-(hydrotioksy)propan-1-on

CH_3-CH_2-CO-S-S-S-CO-CH_2-CH_3

1,1′-trisulfanodiylodi(propan-1-on) (PIN)
1,1′-tritiodi(propan-1-on)

CH_3-CH_2-CO-Se-Se-Se-CH_3

1-(metylotriselanylo)propan-1-on (PIN; pseudoketon)
(nie propanoselenian *Se*-metylodiselanylu, pseudoester; tworzenie pseudoestru wymagałoby fragmentacji jednorodnego łańcucha)
1-(metylotriseleno)propan-1-on

CH_3-CH_2-CO-S-S-S-S-S-CO-CH_3

1-(acetylopentasulfanylo)propan-1-on (PIN)
1-(acetylopentatio)propan-1-on

P-68.4.2 Trzy heterogeniczne sąsiadujące atomy chalkogenu

P-68.4.2.1 Związki typu a(ba)$_n$ są macierzystymi wodorkami; dyskutowano je w P-21.2.3.1.

Przykłady:

HS-O-SH ditioksan (wstępnie wybrana nazwa)

CH_3-S-O-SH metyloditioksan (PIN)
(nie metylosulfano-*OS*-tioperoksol)

CH_3-S-O-S-CH_3
dimetyloditioksan (PIN)

C_6H_5-S-O-S-CH_3
1-metylo-3-fenyloditioksan (PIN)

HS-O-S-OH
ditioksanol (wstępnie wybrana nazwa)
(sulfanyloksy)sulfanol
(nie hydroksysulfano-*OS*-tioperoksol)

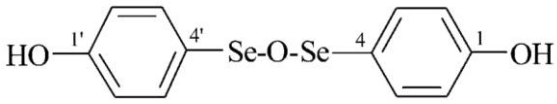
HO-S-O-S-OH
ditioksanodiol (wstępnie wybrana nazwa)
(nie oksydisulfanol)

P-68.4.2.2 Związki typu R-(chalkogen)$_x$-H, gdzie x = 3,4,…, które nie mogą być nazywane jak alkohole, tiole, etery, sulfidy, hydroperoksydy, peroksydy lub ich analogi chalkogenowe jak opisano

w P-63, nazywa się na bazie mononuklearnych macierzystych wodorków ‘oksydanu’ (H_2O), sulfanu’ (H_2S) itd. i ‘dioksydanu’ (HOOH), ‘disulfanu’ (HSSH) itd. Nazywa się je również użyciem przyrostków ‘ol’ (-OH), ‘tiol’ (-SH) itd. zgodnie z P-63.1.2 oraz ‘peroksol’ (-OOH), ‘*SO*-tioperoksol’ (-SOH) itd. zgodnie z P-63.4. Łańcuch dwóch lub trzech kolejnych identycznych atomów chalkogenu nie może zostać rozerwany przy tworzeniu nazwy. Gdy należy dokonać wyboru, przyrostki dobiera się zgodnie z ich starszeństwem; -OH jest starsze od –OOH (patrz P-41).

Przykłady:

HS-OH	CH_3-OO-SH
sulfanol (wstępnie wybrana nazwa) (nie oksydanotiol)	metylodioksydanotiol (PIN)
CH_3-SS-OH	CH_3-OOO-SH
metylodisulfanol (PIN)	metylotrioksydanotiol (PIN)
CH_3-SSS-SeH	CH_3-O-SOH
metylotrisulfanoselenol (PIN)	metyloksydano-*SO*-tioperoksol (PIN)
CH_3-OO-SSH	CH_3-SS-OOH
metylodioksydanoditioperoksol (PIN)	metylodisulfanoperoksol (PIN)
CH_3-O-S-SeSeH	CH_3-S-O-S-OH
metoksysulfanodiselenoperoksol (PIN)	[(metylosulfanylo)oksy]sulfanol (PIN) (nie (metylosulfanylo)oksydano-*SO*-tioperoksol)



4,4′-diselenoksanodiylodifenol (PIN)

P-68.4.2.3 Nazwy mono-, di- i polinuklearnych macierzystych wodorków z wyjątkiem samego ‘oksydanu’, stosuje się dla związków z sąsiadującymi atomami chalkogenu, zakończonymi atomami wodoru.

Przykłady:

HSe-Te-SeH	tellanodiselenol (wstępnie wybrana nazwa) (nie selano-*TeSe*-selenotelluroperoksol)
H-OO-S-OH	(hydroperoksy)sulfanol (wstępnie wybrana nazwa) (nie dioksydano-*SO*-peroksol)

H-OO-SS-H disulfanoperoksol (wstępnie wybrana nazwa)
[nie dioksydano(ditioperoksol)]

P-68.4.2.4 Związki z organiczną grupą na jednym lub oby końcach heterogenicznego łańcucha atomów chalkogenu nazywa się podstawnikowo na bazie preferowanej grupy organicznej. Podstawniki mogą być utworzone z indywidualnych jednostek lub nomenklaturą zamienną funkcji opartą na tri- lub tetraoksy itd. podstawnikach. Druga z metod nie jest używana, gdy związek jest pseudoketonem. Nomenklaturę multiplikacyjną lub zamiennną ('a') szkieletu używa się, gdy wymagania do ich stosowania są spełnione.

Przykłady:

CH_3-O-S-O-CH_3

[(metoksysulfanylo)oksy]metan (PIN)
(metylo-*OSO*-tiotrioksy)metan
dimetoksysulfan

CH_3-OO-S-CH_3

[(metyloperoksy)sulfanylo]metan (PIN)
metylo(metylosulfanylo)dioksydan
(metylo-*OOS*-tiotrioksy)metan

CH_3-S-S-O-CH_2-CH_3

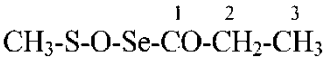
[(metylodisulfanylo)oksy]etan (PIN)
[metylo(ditioperoksy)oksy]etan
etoksy(metylo)disulfan
(metylo-*SSO*-ditiotrioksy)etan

C_6H_5-O-S-O-C_6H_5

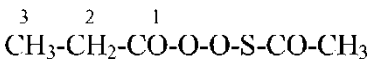
1,1′-[sulfanodiylobis(oksy)]dibenzen (PIN)
OSO-tiotrioksydibenzen

CH_3-O-S-Se-C_6H_5

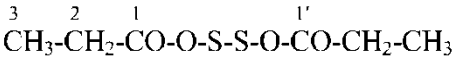
[(metoksysulfanylo)selanylo]benzene (PIN)
metylo-*OSSe*-selenotiotrioksybenzen



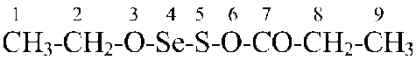
1-{[(metylosulfanylo)oksy]selanylo}propan-1-on (PIN)



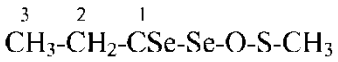
1-[(acetylosulfanylo)peroksy]propan-1-on (PIN)



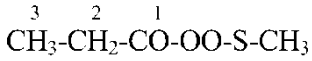
1,1′-[disulfanodiylobis(oksy)]dipropan-1-on (PIN)
1,1′-[ditioperoksybis(oksy)]dipropan-1-on



3,6-dioksa-5-tia-4-selenanonan-7-on (PIN)



1-{[(metylosulfanylo)oksy]selanylo}propan-1-selon (PIN)



1-[metylosulfanylo)peroksy]propan-1-on (PIN)

P-68.4.3 Macierzyste związki chalkogenowe z niestandardową wiązalnością

Wiele związków chalkogenowych określa się nazwami klas, które były używane jako macierzyste struktury w nazywaniu ich pochodnych. W tych zaleceniach, zgodnie z zasadą, iż preferuje się nazwy podstawnikowe, pochodne nazwane na podstawie nazw klasy są zachowane tylko do zastosowania w ogólnej nomenklaturze.

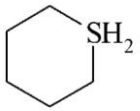
P-68.4.3.1 Sulfany, selany i tellany
P-68.4.3.2 Di- i polisulfoksydy, polisulfony oraz analogi selenowe i tellurowe
P-68.4.3.3 Sulfoimidy i chalkogenowe analogi $H_2E{=}NH$, gdzie E = S, Se lub Te
P-68.4.3.4 Sulfinyloaminy $RN{=}E{=}O$, sulfonyloaminy $RN{=}E(=O)_2$ i analogi chalkogenowe, gdzie E = S, Se lub Te
P-68.4.3.5 Sulfonodiiminy $RE(=NH)_2R'$ i chalkogenowe związki, gdzie E = S, Se lub Te
P-68.4.3.6 Sulfoksyimidy $R_2E(=O){=}NR'$ i chalkogenowe analogi, gdzie E = S, Se lub Te
P-68.4.3.7 Diimidy siarki $HN{=}E{=}NH$ i chalkogenowe analogi, gdzie E = S, Se lub Te
P-68.4.3.8 Triimidy siarki $E(=NH)_3$ i chalkogenowe analogi, gdzie E = S, Se lub Te

P-68.4.3.1 Sulfany, selany i tellany

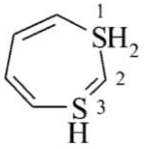
Sulfany, selany i tellany o niestandardowej wiązalności nazywa się na bazie macierzystych wodorków, takich jak λ^4-sulfan, λ^6-sulfan i λ^4-selan, zgodnie z konwencją λ.

Przykłady:

$CH_2{=}S(CH_3)_2$	dimetylo(metylideno)-λ^4-sulfan (PIN)
$(CH_3{-}O)_4S$	tetrametoksy-λ^4-sulfan (PIN) [(trimetoksy- λ^4-sulfanyl)oksy]metan



λ^4-tian (PIN)



1*H*-1λ^4,3λ^4-ditiepin (PIN)

P-68.4.3.2 Di- i polisulfoksydy, polisulfony oraz analogi selenowe i tellurowe

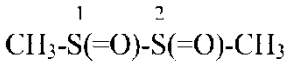
Związki o ogólnych strukturach R-[SO]$_n$-R′ i R-[SO$_2$]$_n$-R′, w których $n \geq 2$, mają nazwę klasy – ‘disulfoksydy’, ‘trisulfoksydy’, ‘disulfony’ itd. Wraz z analogami selenowymi i tellurowymi nazywa się je dwoma sposobami:

(1) metodą podstawnikową, dodając przyrostek ‘on’ do nazwy odpowiedniego wodorku macierzystego, λ^4 lub λ^6 disulfano, diselano, ditellano itd.;

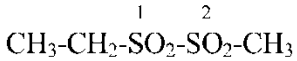
(2) nomenklaturą klas, używając nazw klas, takich jak ‘disulfotlenek’, ‘disulfon’, ‘diselenotlenek’, ‘diselenon’ itd.

Metodą (1) tworzy się preferowane nazwy IUPAC i także używa się ją do nazywania mieszanych sulfoksydo-sulfonów.

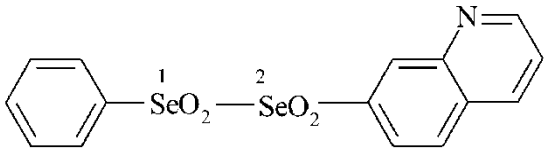
Przykłady:



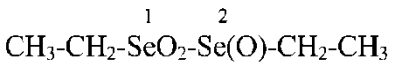
1,2-dimetylo-1λ^4,2λ^4-disulfano-1,2-dion (PIN)
disulfoksyd dimetylowy



1-etylo-2-metylo-1λ^6,2λ^6-disulfano-1,1,2,2-tetron (PIN)
disulfon etylowo-metylowy



1-fenylo-2-(chinolin-7-ylo)-1λ^6,2λ^6-diselano-1,1,2,2-tetraon (PIN)
diselenon (chinolino-7-ylowo)-fenylowy



dietylo-1λ^6,2λ^4-diselano-1,1,2-trion (PIN)
1-[(etanoseleninylo)selenonylo]etan
1-[(etyloseleninylo)selenonylo]etan

P-68.4.3.3 Sulfoimidy i chalkogenowe analogi, $H_2E{=}NH$, gdzie E = S, Se lub Te

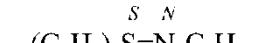
Związki o ogólnych strukturach $H_2S{=}NH$ należą do klasy nazwanej ‘sulfoimidami’ (CAS nazywa je sulfiloiminami). Nazywa się je dwoma sposobami:

(1) podstawnikowo dodając przyrostek ‘imina’ do nazwy macierzystego wodorku, takiego jak λ^4-sulfan;

(2) podstawnikowo z użyciem nazwy klasy ‘sulfoimid’.

Metodą (1) tworzy się preferowane nazwy IUPAC.

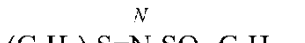
Przykład:



S,*S*-dietylo-*N*-fenylo-λ^4-sulfanoimina (PIN)
S,*S*-dietylo-*N*-fenylosulfoimid

Podstawienie *N* i/lub *S* grupami nie będącymi grupami hydrokarbylowymi może utworzyć struktury macierzyste o wyższym prirytecie, które stają się podstawą nazwy.

Przykład:

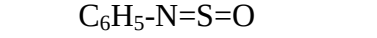


N-(difenylo-λ^4-sulfanylideno)benzenosulfonoamid (PIN)
S,*S*-difenylo-*N*-benzenosulfonylosulfoimid

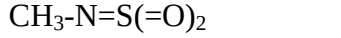
P-68.4.3.4 Sulfinyloaminy RN=E=O, sulfonyloaminy RN=E(=O)$_2$ i chalkogenowe analogi, gdzie E = S, Se, Te.

Związki o ogólnych strukturach R-N=S=O i R-N=S(=O)$_2$ mają nazwy klas odpowiednio ‘sulfinyloaminy’ i ‘sulfonyloaminy’. Nazywa się je podstawnikowo na podstawie macierzystych wodorków λ^4-sulfanu lub λ^6-sulfanu.

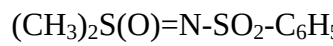
Przykłady:



(fenyloimino)-λ^4-sulfanon (PIN)
(nie *N*-sulfinyloanilina)



(metyloimino)-λ^6-sulfanodion (PIN)
(nie *N*-sulfonylometanoamina)



N-[dimetylo(okso)-λ^6-sulfanylideno]benzenosulfonoamid (PIN)
(benzenosulfonyloimino)dimetylo-λ^6-sulfanon

P-68.4.3.5 Sulfonodiiminy RE(=NH)$_2$R′i chalkogenów analogi gdzie E = S, Se lub Te

Nazwa klasy związków o ogólnych strukturach RE(=NH)$_2$R′ to ‘sulfonodiiminy’. Preferowane nazwy IUPAC tworzy się podstawnikowo na bazie macierzystego wodorku λ^6-sulfanu. Nazwy oparte na nazwie klasy ‘sulfonodiimina’ nie są zalecane.

Przykład:

$(C_6H_5)_2S(=NH)_2$ difenylo-λ^6-sulfanodiimina (PIN)
(nie sulfonodiimina difenylu)

P-68.4.3.6 Sulfoksoimidy $R_2E(=O)=NR'$ (E = S) i chalkogenowe analogi, gdzie E = Se, Te

Związki o ogólnej strukturze $R_2E(=O)=NR'$ mają nazwę klasy „sulfoksyimidy" (CAS nazywa je sulfoksyiminami). Preferowane przez IUPAC nazwy tworzy się metodą podstawnikową na bazie macierzystego wodorku λ^6-sulfanu. Nazwy wynikające z metody podstawnikowej mogą być również oparte na macierzystej nazwie funkcyjnej „sulfoksyimid".

Przykład:

$(CH_3)_2S(=O)=N\text{-}C_6H_5$ dimetylo(fenyloimino)-λ^6-sulfanon (PIN)
S,*S*-dimetylo-*N*-fenylosulfoksyimid

P-68.4.3.7 Diimidy siarki HN=E=NH i analogi chalkogenowe, gdzie E = Se, Te

Związki o ogólnej strukturze HN=S=NH należą do ogólnej klasy mającej o nazwie klasowej 'diimidy siarki'. Preferowane nazwy IUPAC tworzy się podstawnikowo na bazie macierzystego wodorku λ^4-sulfanu. Nazwy klasowo-funkcyjne oparte są nazwie klasy 'diimid siarki'.

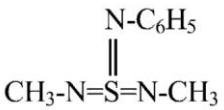
Przykład:

$CH_3\text{-}N=S=N\text{-}CH_2\text{-}CH_3$ etylo(metylo)-λ^4-sulfanodiimina (PIN)
diimid etylometylosiarki

P-68.4.3.8 Triimidy siarki, $E(=NH)_3$ i chalkogenowe analogi, gdzie E = S, Se lub Te

Związki o ogólnej strukturze $S(=NH)_3$ należą do ogólnej klasy zwanej 'triimidy siarki'. Preferowane nazwy IUPAC tworzy się podstawnikowo na bazie macierzystego wodorku λ^6-sulfanu. Nazwy klasowo-funkcyjne oparte są na nazwie klasy 'triimid siarki'.

Przykład:



dimetylo(fenylo)-λ^6-sulfanotriimina (PIN)
triimid dimetylo(fenylo)siarki

P-68.5 NOMENKLATURA ZWIĄZKÓW PIERWIASTKÓW 17 GRUPY

P-68.5.0 Nomenklatura podstawnikowa
P-68.5.1 Nomenklatura oparta na macierzystych wodorkach halogenów
P-68.5.2 Nomenklatura kwasów halogenów
P-68.5.3 Amidy kwasów halogenów

P-68.5.0 Nomenklatura podstawnikowa

W nomenklaturze podstawnikowej atomy halogenu określane są tylko przez właściwe przedrostki (patrz P-61.3); w nomenklaturze klasowo-funkcyjnej przez ich nazwę klasy (patrz P-15.2), a w nomenklaturze zamiennej funkcji przez przedrostki i wrostki (patrz P-65.2.1.5).

Przykłady:

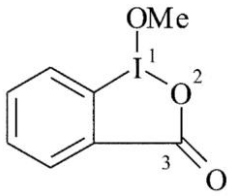
CH_3-Cl	C_6H_5-ClO
chlorometan (PIN) chlorek metylu	chlorozylobenzen (PIN)
CH_3-CH_2-CO-Br	CH_3-CH_2-SO_2-Cl
bromek propanoilu (PIN) bromek propionylu	chlorek etanosulfonylu (PIN)
C_6H_5-P(O)Cl_2	CH_3-BCl_2
dichlorek fenylofosfonowy (PIN)	dichloro(metylo)boran (PIN)
$CH_3P(Cl)(S\text{-}C_2H_5)$	metylofosfonochlorydotionin (PIN) (nie metanofosfonochlorydotionin etylu)

P-68.5.1 Nomenklatura oparta na macierzystych wodorkach halogenu

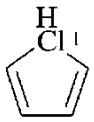
Dla oznaczania niestandardowej wiązalności w cyklicznych i acyklicznych macierzystych wodorkach stosowana jest konwencja lambda.

Przykłady:

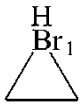
C_6H_5-I$(OH)_2$	CH_3-ICl_2
fenylo-λ^3-jodanodiol (PIN)	dichloro(metylo)-λ^3-jodan (PIN)
$(CH_3\text{-}CO\text{-}O)_2$I-	bis(acetyloksy)-λ^3-jodanylo (preferowany przedrostek) (nie diacetoksyjodo)
$(HO)_2$I-	dihydroksy-λ^3-jodanyl (wstępnie wybrana nazwa) (nie dihydroksyjodo)



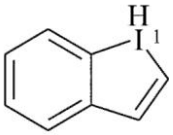
1-metoksy-1λ^3,2-benzojodoksol-3(1*H*)-on (PIN)



1*H*-1λ^3-chlorol (PIN)



1λ^3-bromiran (PIN)



1*H*-1λ^3-benzojodol (PIN)

P-68.5.2 Nomenklatura kwasów halogenów

Kwasy halogenowe: kwas hypochlorawy, chlorawy HO-ClO, chlorowy HO-ClO_2 i perchlorowy HO-ClO_3, a podobne kwasy, w których atomy Br, F i I zajmują miejsce chloru, dyskutowano w P-67.1.1. Tworzą one estry (patrz P-67.1.3.2), takie jak 'chloryn metylu' CH_3-O-ClO i anhydrydy (patrz P-67.1.3.3), tak jak 'anhydryd benzoesowo-hypochlorawy" C_6H_5-CO-O-Cl.

Podstawniki pochodzące od kwasów halogenów, takie jak chlorozyl –ClO, bromyl –BrO_2 i perjodyl –IO_3 omawiano w P-67.1.4.5 i ilustrowano w P-61.3.2.3.

P-68.5.3 Amidy kwasów halogenowych

Aby uzyskać preferowane nazwy IUPAC dla amidów kwasów halogenowych, stosuje się porządek starszeństwa klas (P-41).

Przykłady:

CH_3-NH-BrO_2	amid *N*-metylobromowy (PIN) *N*-bromylometanoamina
CH_3-CH_2-NH-Cl	amid *N*-etylohypochlorawy (PIN, patrz P-62.4) *N*-chloroetanoamina

P-69 NOMENKLATURA ZWIĄZKÓW METALOORGANICZNYCH

P-69.0 Wprowadzenie
P-69.1 Związki metaloorganiczne z udziałem pierwiastków grup 13 - 16
P-69.2 Związki metaloorganiczne z udziałem pierwiastków grup 3 - 12

P-69.3 Związki metaloorganiczne z udziałem pierwiastków grup 1 i 2
P-69.4 Metalocykle
P-69.5 Porządek starszeństwa związków metaloorganicznych

P-69.0 WPROWADZENIE

Ten rozdział częściowo dotyczy zastosowania zasad, reguł i konwencji ustalonych w poprzednich rozdziałach oraz jest częściowo rozszerzeniem tych zasad, reguł i konwencji, aby pogodzić nomenklaturę związków organicznych i nieorganicznych (patrz odn. 12) celem nazywania związków metaloorganicznych.

Związki metaloorganiczne są związkami mającymi co najmniej jedno wiązanie pomiędzy jednym atomem metalu a jednym atomem węgla. Dodając do tradycyjnych metali, niektóre związki zawierające pierwiastki takie jak bor, arsen i selen, połączone z atomem węgla, są czasami rozważane jako metaloorganiczne.

W tych zaleceniach nomenklatura metaloorganiczna jest podzielona na trzy kategorie:

(1) związki metaloorganiczne z udziałem pierwiastków grup 1 i 2;

(2) związki metaloorganiczne z udziałem pierwiastków grup 3 - 12 (metale przejściowe);

(3) związki metaloorganiczne z udziałem pierwiastków grup 13 - 16.

Zatem, duża część nomenklatury związków metaloorganicznych jest poza zasięgiem tej książki, która dotyczy związków organicznych; śledzi ona zasady, reguły i konwencje nomenklatury związków nieorganicznych opisane w Nomenklaturze Chemii Nieorganicznej (Czerwona Książka), w szczególności rozdział IR-10, odn 12.

Wszystkie związki metaloorganiczne można nazywać rodzajem nomenklatury addycyjnej nazywanej wygodniej nomenklaturą koordynacyjną, w której to nazwy związków tworzy się dodając nazwę(y) ligandu(ów) do atomu centralnego, w porządku alfanumerycznym – jeżeli jest więcej niż jeden (odn. 12, rozdziały I-7, I-9). Jednak, związki metaloorganiczne pierwiastków grup od 13 do 16 można również nazywać używając nomenklatury podstawnikowej, jak pokazano w rozdziale P-68.

W tym rozdziale rozważa się wszystkie związki metaloorganiczne, po pierwsze, związki pierwiastków grup 13 - 16, które nazywane są podstawnikowo, następnie związki pierwiastków przejściowych (grupy 3 - 12) oraz związki pierwiastków grup 1 i 2, które są nazywane addycyjnie. W końcu, omówione zostały zasady starszeństwa niezbędne do nazywania związków należących do obu wspomnianych kategorii.

Preferowane nazwy IUPAC są wskazane dla związków metaloorganicznych metali grup 14 - 16 nazywanych podstawnikowo. Niemniej jednak, nie są wskazane ani preferowane nazwy IUPAC ani nazwy wstępnie wybrane (patrz P-12.2) dla związków metaloorganicznych z udziałem pierwiastków przejściowych (włączając pierwiastki grupy 3) i pierwiastki grup 1 i 2, z wyjątkiem ‘ocenów’. To ustalenie czeka na rozważenie problemu przez grupy mające za zadanie nomenklaturę nieorganiczną i/lub metaloorganiczną.

P-69.1 ZWIĄZKI METALOORGANICZNE Z UDZIAŁEM PIERWIASTKÓW GRUP 13 - 16

Związki metaloorganiczne z udziałem pierwiastków grup 13, 14, 15 i 16 nazywa się podstawnikowo przez poprzedzenie nazwy macierzystego wodorku nazwami odpowiednich podstawników; są one preferowanymi nazwami IUPAC. Zasady, reguły i konwencje ich nazywania przedyskutowano w rozdziale P-68.

Przykłady:

$Al(CH_2\text{-}CH_3)_3$ trietyloaluman (nazwa podstawnikowa)

$Pb(CH_2\text{-}CH_3)_4$ tetraetyloplumban (PIN; nazwa podstawnikowa)

$BrSb(CH{=}CH_2)_2$ bromodietenylostyban (PIN; nazwa podstawnikowa)

$HIn(CH_3)_2$ dimetyloindygan (nazwa podstawnikowa)

P-69.2 ZWIĄZKI METALOORGANICZNE Z UDZIAŁEM PIERWIASTKÓW GRUP 3 - 12

P-69.2.1 Nomenklatura koordynacyjna jest podstawową metodą nomenklatury związków metaloorganicznych pierwiastków grup od 3 do 12. Jest ona opisana w *Nomenklaturze Chemii Nieorganicznej* (IR-10, odn. 12). W tym rozdziale opisano ją krótko i zilustrowano przykładami.

P-69.2.2 Definicje terminów

W następujących zasadach, pewne terminy są używane w sensie tutaj przedstawionym. '**Idywiduum koordynacyjne'** odnosi się do cząsteczek lub jonów, w których jest atom (A), do którego dołączone są inne atomy (B) lub grupy (C). Atom (A) jest określany jako '**atom centralny'**, a wszystkie inne atomy połączone bezpośrednio z (A) nazywane są '**ligandami'**. Każdy atom centralny (A) ma **'liczbę koordynacyjną'**, która jest liczbą atomów połączonych z nim bezpośrednio. Grupa zawierająca więcej niż jeden potencjalny atom koordynacyjny nazywana jest **multidentnym** ligandem, a liczba potencjalnych atomów koordynacyjnych wskazana jest terminem **monodentny**, **didentny**, itd. Ligand '**chelatujący'** jest grupą przyłączoną do atomu centralnego poprzez dwa lub więcej atomów koordynacyjnych, podczas gdy '**grupa mostkowa'** jest przyłączona do więcej niż jednego centrum koordynacyjnego. '**Polinuklearne'** idywiduum koordynacyjne zawiera więcej niż jeden atom centralny, a ich liczba jest określana terminami '**mononuklearna**', '**dinuklearna**', etc. cząsteczka.

Wzory liniowe składają się z symbolu atomu centralnego, a następnie z ligandów w porządku alfabetycznym (jak napisane), jeżeli obecny jest więcej niż jeden (IR-4.4.3.2, odn. 12). [Jest to zmiana w stosunku do opisanych w 1990 roku zaleceniach Nomenklatury Nieorganicznej]. We wzorze liniowym indywiduum koordynacyjne jest zawsze umieszczone w nawiasach kwadratowych. Nawiasy nie są wymagane, gdy struktura opiera się o rozbudowane wzory organiczne. Skróty używane są do przedstawiania skomplikowanych ligandów organicznych we wzorze (chociaż nie powinny być one używane w nazwach), na przykład Et = etyl, ox = etanodiato lub oksalano i py = pirydyna; (patrz IR-4.4.3.2 i Tabele VII i VIII, odn. 12).

W nazwach związków koordynacyjnych nazwę atomu centralnego umieszcza się po nazwach ligandu(ów), które są wymienione w porządku alfabetycznym bez względu na ich liczbę każdego z nich. Związek lub złożony ligand traktuje się jako pojedynczą jednostkę. Nazwy ligandów

anionowych, organicznych czy nieorganicznych, kończą się na litrę ‘o’, którą dodaje się do nazwy anionu.

Przykłady:

CH_3^-	metanido (dla przyrostka ‘id’, patrz P-72.2.2.1)
$C_6H_5^-$	benzenido
$(CH_3)_2As^-$	dimetyloarsanido
$CH_3\text{-}COO^-$	octano (dla końcówki ‘an’, patrz P-65.6.1)

Zgodnie z długą tradycją, nazwy podstawników zdefiniowane w rozdziale P-29, można również stosować jako nazwy ligandów.

Przykłady:

CH_3-	metyl
C_6H_5-	fenyl
$(CH_3)_3Si$-	trimetylosilil

Nazwa cząsteczki koordynowanej (ligandu obojętnego) lub kationu jako ligandu używana jest bez zmiany.

Przykłady:

$(CH_3\text{-}CH_2)_3P$	trietylofosfan
$CH_3\text{-}NH_2$	metanoamina

Wyjątkowo, cząsteczki H_2O, NH_3, CO i NO nazywane są ‘akwa’, ‘amina, ‘karbonyl’ i ‘nitrozyl’, gdy są ligandami.

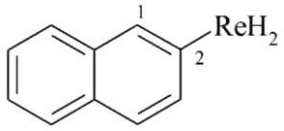
P-69.2.3 Związki z co najmniej jednym wiązaniem pojedynczym metal-węgiel

Związki nazywa się wymieniając nazwy ligandów włącznie z atomem (atomami) wodoru w porządku alfabetycznym, a następnie podając nazwę metalu. Obecność wodoru przyłączonego do atomu metalu musi być zawsze wskazana przedrostkiem ‘hydrydo’.

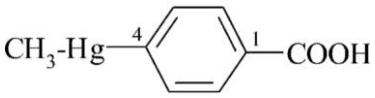
Przykłady:

$[Ti(CH_3)Cl_3]$	trichlorydo(metanido)tytan trichlorydo(metylo)tytan
$[Pt\{C(O)\text{-}CH_3\}(CH_3)(PEt_3)_2]$	acetylo(metanido)bis(trietylofosfan)platyna (metylo)bis(trietylofosfan)platyna

$[Os(CH_2\text{-}CH_3)(NH_3)_5]Cl$ chlorek pentaamina(etanido)osm(1+)
chlorek pentaamina(etylo)osm(1+)



dihydrydo(naftalen-2-ido)ren
dihydrydo(naftalen-2-ylo)ren

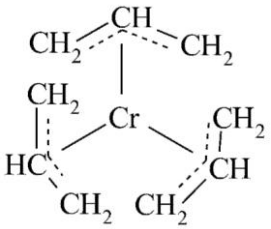


(4-karboksybenzenido)metanidortęć
(4-karboksyfenylo)metylortęć

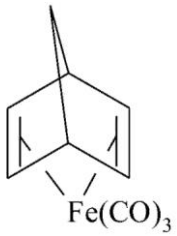
P-69.2.4 Grupy metaloorganiczne z wielocentrowymi wiązaniami do atomów węgla

W celu oznaczenia wielocentrowego wiązania do atomów węgla, na przykład w układzie nienasyconym, nazwę ligandu poprzedza przedrostek η (eta). Prawy indeks górny dodaje się do symbolu η w celu oznaczenia liczby atomów związanych z metalem. Gdy jest konieczne wskazanie, iż nie wszystkie miejsca nienasycenia są związane z metalem, dodaje się cyfrowe lokanty przed symbolem η. Konieczne może być również oznaczenie pojedynczego atomu w ligandzie, który jest bezpośrednio przyłączony do metalu; w tym przypadku stosuje się symbol κ (kappa) przed symbolem pierwiastka oznaczającego specyficzne miejsce związane z metalem. Patrz IR-10.2.5.1 i IR-10.2.3.3 (odn. 12) dla pełnej dyskusji nad użyciem symboli η i κ w nomenklaturze addycyjnej.

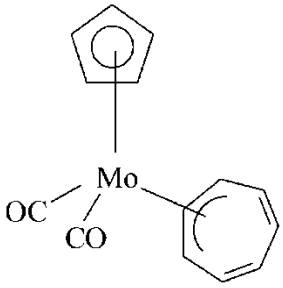
Przykłady:



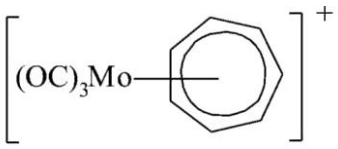
tris(η^3-allilo)chrom



[(2,3,5,6-η^4)-bicyklo[2.2.1]hepta-2,5-dien]trikarbonylożelazo



dikarbonylo[(1-3-η)-cyklohepta-2,4,6-trien-1-ido](η^5-cyklopenta-2,4-dien-1-ido)molibden
dikarbonylo[1-3-η)-cyklohepta-2,4,6-trien-1-ylo](η^5-cyklopenta-1,4-dien-1-ylo)molibden
dikarbonylo[1-3-η)-cyklohepta-2,4,6-trien-1-ido](η^5-cyklopentadienido)molibden

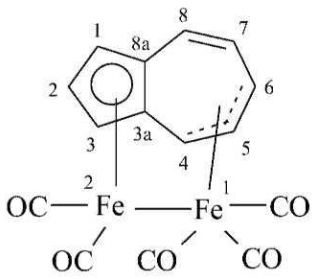


trikarbonylo(η^7-cykloheptatrienylo)molibden(1+)
trikarbonylo(η^7-cyklohepta-2,4,6-trien-1-ylo)molibden(1+)

P-69.2.5 Mostkowe metaloorganiczne grupy z wielocentrowymi wiązaniem atomów węgla

Przedrostek ‘μ’ (patrz IR-10.2.3.1, odn. 12) dodaje się przed nazwą ligandu mostkowego, aby oznaczyć mostkowanie pomiędzy dwoma atomami metalu. Lokanty pozycji ‘η’ oddziela się dwukropkiem, a myślnik dodaje się po nazwie grupy mostkowej. Bezpośrednie wiązanie pomiędzy atomami metali oznaczono jak opisano w IR-10.2.5.1 (odn. 12).

Przykłady:

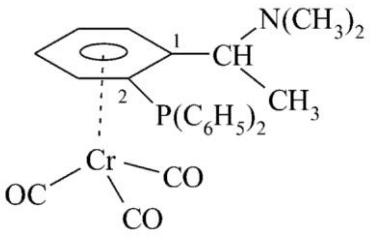


{μ-[2(1-3,3a,8a-η):1(4-6-η)]azulen}-(pentakarbonylo-1κ^3*C*, 2κ^2*C*)diżelazo(*Fe—Fe*)

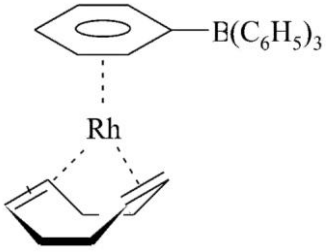
P-69.2.6 Związki metaloorganiczne z nienasyconymi cząsteczkami i podstawnikami

Cząsteczki organiczne używane jako ligandy nazywa się podstawnikowo zgodnie z regułami, zasadami i konwencjami nomenklatury podstawnikowej i wymienia się w nazwie związku metaloorganicznego z odpowiednimi symbolami ‘η’ (hapto). Metoda ta jest korzystniejsza od polegającej na użyciu przedrostków tylko do oznaczania grup charakterystycznych w części organicznej związku metaloorganicznego.

Przykład:



trikarbonylo{1-[2-(difenylofosfanylo)-η^6-fenylo]-*N*,*N*-dimetyloetano-1-amina}chrom

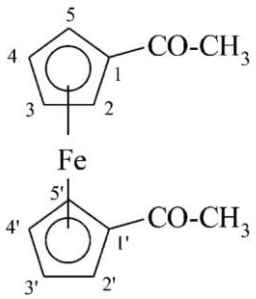


[(1,2,5,6-η)-cyklookta-1,5-dien](η^6-fenylotrifenyloboranoido)rod
[(1,2,5,6-η)-cyklookta-1,5-dien](η^6-fenylotrifenyloborano)rod

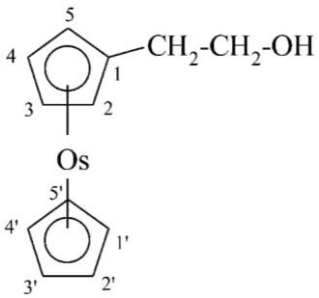
P-69.2.7 ‘Oceny’

‘Oceny’ są kompleksami bis(η^5-cyklopenta-2,4-dien-1-ido) lub bis(η^5-cyklopenta-2,4-dien-1-yl) lub bis(η^5-cyklopentadienido) pewnych metali. Nazwy ferrocen, rutenocen, osmocen, niklocen, chromocen, kobaltocen i wanadocen są nazwami związków odpowiadających ‘bis(η^5-cyklopenta-2,4-dien-1-yl)metal’, gdzie atomem metalu jest Fe, Ru, Os, Ni, Cr, Co i V. Oceny rozważa się jako heterocykle, a starszeństwo oparte jest o rozszerzenie listy starszeństwa heterocykli na grupy 12, 11, 10, 9, 8, 7, 6, 5, 4, 3, 2, 1, na przykład niklocen > kobaltocen > ferrocen. Nazwy te są podstawiane zgodnie z zasadami, regułami i konwencjami nomenklatury podstawnikowej z użyciem przyrostków lub przedrostków celem oznaczenia grup charakterystycznych .

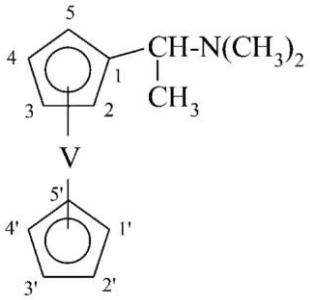
Przykłady:



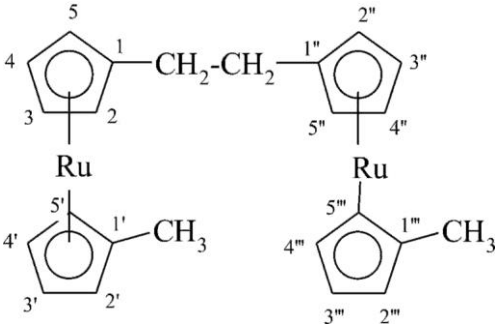
1,1′(ferroceno-1,1′-diylo)di(etan-1-on) (PIN)
1,1′-diacetyloferrocen



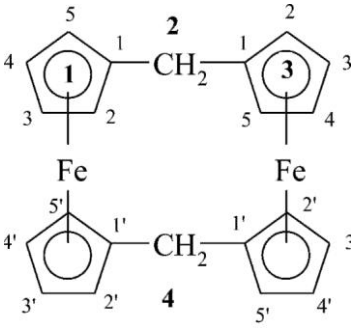
2-(osmocen-1-ylo)etanol (PIN)
1-(2-hydroksyetylo)osmocen



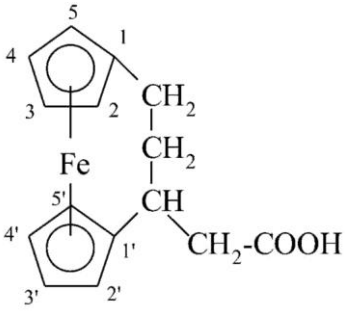
N,*N*-dimetylo(wanadocen-1-yl)etano-1-amina (PIN)
1-[1-(dimetyloamino)etylo]wanadocen



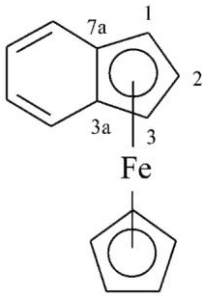
1,1′′-(etano-1,2-diylo)bis(1′-metylorutenocen) (PIN)



1(1,1′),3(1,1′)-diferrocenacylotetrafan (PIN)



1,1′-(4-karboksybutano-1,3-diylo)ferrocen (PIN)
kwas 3,5-(ferrocen-1,1′-diylo)pentanowy



benzoferrocen (PIN)
(η^5-cyklopenta-2,4-dien-1-ido)[1,2,3,3a,7a)-η^5-1*H*-inden-1-ido]żelazo
(η^5-cyklopenta-2,4-dien-1-ylo)[1,2,3,3a,7a)-η^5-1*H*-inden-1-ylo]żelazo
(η^5-cyklopentadienido)[1,2,3,3a,7a)-η^5-indenido]żelazo

P-69.3 ZWIĄZKI METALOORGANICZNE PIERWIASTKÓW GRUP 1 I 2

Chociaż wiele związków metaloorganicznych pierwiastków grup 1 i 2 istnieje w związanej formie cząsteczkowej i zawiera strukturalny rozpuszczalnik, ich nazwy oparte są na stechiometrycznym składzie związków, a rozpuszczalnik (jeżeli jest jakiś) pomija się. Nazwy addycyjne tworzy się wymieniając nazwy ligandów wskazujących grupy organiczne i ligand ‘hydrydo’ oznaczający atomy wodoru (jeżeli występują) w porządku alfabetycznym, a następnie nazwę metalu.

Przykłady:

[BeEtH]	etylohydrydoberyl etanidohydrydoberyl
$NaCH{=}CH_2$ lub $[Na(CH{=}CH_2)]$	etenidosód etenylosód winylosód (etenid sodu jest również akceptowany; jest nazwą kompozycyjną analogicznie do chlorku sodu; patrz IR-5, odn. 12)
[LiMe]	metanidolit metylolit
$[(LiMe)_4]$	tetra-μ_3-metanidotetralit tetra-μ_3-metylotetralit
$(LiMe)_n$	poli(metylolit) poli(metanidolit)
LiMe	metanid litu (nazwa kompozycyjna; patrz IR-5, odn. 12)
MgI(Me)	jodydo(metanido)magnez (nazwa addytywna typu koordynacji)

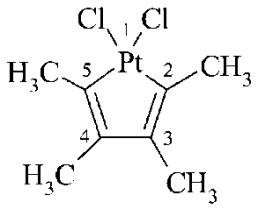
[MgMe]I	jodek metylomagnu (nazwa kompozycyjna; formalnie elektrododatni składnik nazwany nomenklaturą addytywną)
$[(MgI(Me)]_n$	poli[jodydo(metanido)magnez lub poli[jodo(metylo)magnez]
MgIMe	jodek metanidek magnezu (nazwa kompozycyjna, patrz IR-5, odn. 12)

P-69.4 METALACYKLE

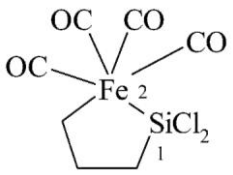
Metalacykle są organicznymi heterocyklami, w których jeden lub więcej heteroatomów są atomami metalu innego niż metale zwykle włączone do systemu nomenklatury heteromonocykli (patrz P-22.2). Można je nazywać rozszerzając system Hantzscha-Widmana, włączając pierwiastki metaliczne w dodatku do tych z grup od 13 do 16, ale ze standardową wartościowością '0' i rdzeniami opisanymi w Tabeli 2.5, na przykład 'ina' i 'inan' odpowiednio dla nienasyconych i nasyconych sześcioczłonowych heterocykli lub wybranie macierzystego pierścienia lub układu pierścieni węglowodoru i zastąpienie jednego lub więcej atomów atomem metalu z grup od 2 do 12 używając nieodłącznego przedrostka ('a') zamiany szkieletu celem utworzenia metalocyklicznego wodorku macierzystego. Nazwa jest dopasowana do obserwowanego wzoru przez podstawienie z użyciem rozłącznych przedrostków w pierścieniu i nazw odpowiednich ligandów do opisu atomów lub grup dołączonych do atomu metalu.

Opcja włączania pierwiastków metalicznych dodatkowo do metali grup 13 - 16 w systemie Hantzscha-Widmana i ich przedrostków ('a') zamiany szkieletu są główną zmianą w stosunku do poprzednich zaleceń systemu Hantzscha-Widmana.

Uwaga: Przyjęto projekt rozważający nomenklaturę metalacykli zawierających metale przejściowe. Przykłady:

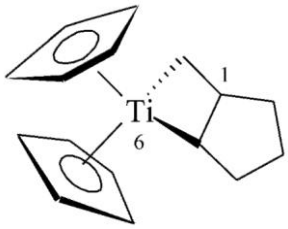


1,1-dichlorydo-2,3,4,5-tetrametyloplatynol (nazwa typu Hantzscha-Widmana)
1,1-dichlorydo-2,3,4,5-tetrametylo-1-platynacyklopenta-2,4-dien (nazwa zamienna szkieletu)

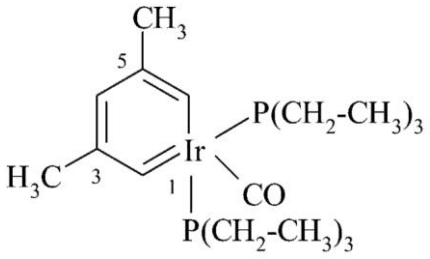


2,2,2,2-tetrakarbonylo-1,1-dichloro-1,2-silaferrolan (nazwa typu Hantzscha-Widmana)

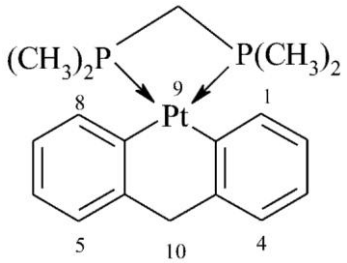
2,2,2,2-tetrakarbonylo-1,1-dichloro-1-sila-2-ferracyklopentan (nazwa zamienna szkieletu)



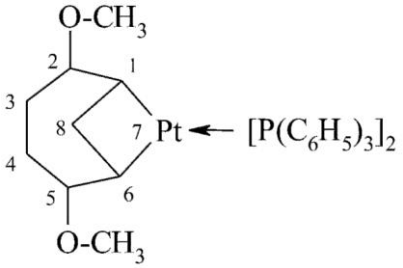
6,6-di(η^5-cyklopentadienylo)-6-tytanabicyklo[3.2.0]heptan (nazwa zamienna szkieletu)
6,6-di(η^5-cyklopentadienido)-6-tytanabicyklo[3.2.0]heptan (nazwa zamienna szkieletu)



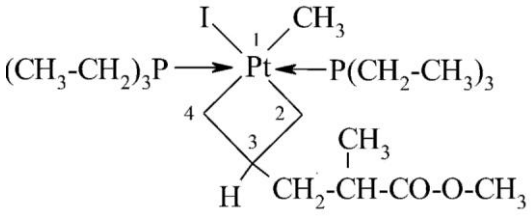
1-karbonylo-3,5-dimetylo-1,1-bis(trietylofosfano)irydyn (nazwa typu Hantzscha-Widmana)
1-karbonylo-3,5-dimetylo-1,1-bis(trietylofosfano)-1-irydabenzen (nazwa zamienna szkieletu)



9,9-[metylenobis(dimetylofosfano)-10*H*-9-platynaantracen (nazwa zamienna szkieletu)



2,5-dimetoksy-7,7-bis(trifenylofosfano)-7-platynabicyklo[4.1.1]oktan (nazwa zamienna szkieletu)



3-[1-jodydo-1-metylo-1,1-bis(trietylofosfano)platynoetan-3-ylo]-2-metylopropanian metylu (nazwa typu Hantzscha-Widmana)

3-[1-jodydo-1-metanido-1,1-bis(trietylofosfano)platynoetan-3-ylo]-2-metylopropanian metylu (nazwa typu Hantzscha-Widmana)

3-[1-jodydo-1-metylo-1,1-bis(trietylofosfano)-1-platynacyklobutan-3-ylo]-2-metylopropanian metylu (nazwa zamienna szkieletu)

P-69.5 PORZĄDEK STARSZEŃSTWA DLA ZWIĄZKÓW METALOORGANICZNYCH

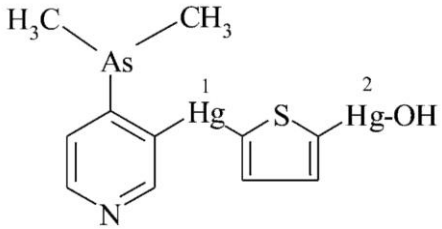
Kiedy dwa różne metale są obecne w związku metaloorganicznym, jeden z nich musi być wybrany jako podstawa nazwy. Metale sklasyfikowano na:

(1) metale grup od 1do12; i

(2) metale grup od 13 do 16.

P-69.5.1 Związki mające dwa identyczne lub różne atomy metali należących do klasy (1) nazywa się addytywnie z użyciem metodologii opisanej w rozdzialei IR-9.2.5 odn. 12 oraz porządku starszeństwa z Tabeli sekwencji pierwiastków rozpoczynając od Zn, to znaczy: Zn > Cd > Hg > …..Li > Na > K > Rb > Cs > Fr (patrz tabela VI, odn. 12).

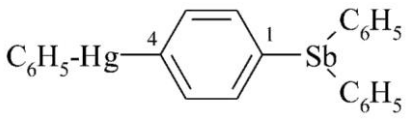
Przykład:



1-[4-(dimetyloarsanylo)pirydyn-3-ylo]-2-hydroksydo-μ-tiofeno-2,5-diylo-dirtęć

P-69.5.2 Związki mające jeden atom metalu z klasy (1) i inny atom z klasy (2) nazywa się addycyjnie używając atom metalu z klasy (1) jako atom centralny, tak jak w P-69.5.1; atom drugiego metalu nazywa się jak podstawnik w nomenklaturze podstawnikowej lub jako obojętny ligand.

Przykład:



[4-(difenylostibanylo)fenylo](fenylo)rtęć

P-69.5.3 Nomenklatura podstawnikowa używana jest dla związków metaloorganicznych mających dwa atomy metali należących do klasy (2), jak opisano w rozdziale P-68. Szereg starszeństwa do wyboru wodorku macierzystego opisany w rozdziale P-41: Sb > Bi > Ge > Sn > Pb > Al > Ga > Tl.

Przykłady:

$(C_6H_5)_2Bi\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}Pb(C_2H_5)_3$

difenylo[3-(trietyloplumbylo)propylo]bizmutan (PIN)

$H_2Bi\text{-}GeH_3$ germylobizmutan

$Pb(SnH_3)_4$ plumbanotetraylotetrakis(stannan)

ROZDZIAŁ P-7 RODNIKI, JONY I POKREWNE RODZAJE

P-70 Wprowadzenie
P-71 Rodniki
P-72 Aniony
P-73 Kationy
P-74 Jony obojnacze (zwitterjony)
P-75 Jonorodniki
P-76 Zdelokalizowane rodniki i jony
P-77 Sole

P-70 WPROWADZENIE

P-70.1 Ogólna metodologia
P-70.2 Starszeństwo rodników i jonów
P-70.3 Tworzenie nazwy
P-70.4 Ogólne reguły wyboru preferowanych nazw

P-70.1 OGÓLNA METODOLOGIA

W tym rozdziale opisana jest nomenklatura rodników, jonów i pokrewnych rodzajów. Jej reguły opierają się na tych samych co dla związków organicznych zasadach, zdefiniowanych w rozdziałach od P-1 do P-6. Nomenklatura została poprawiona w 1993 roku (odn. 3). Definicje, symbole i konwencje patrz odn. 14; patrz także odn. 28. W zaleceniach z 1979 roku (odn. 1) rodniki nazywano ‘wolnymi rodnikami’ w celu odróżnienia od przedrostków podstawników, które również nazywane były rodnikami. W publikacjach z 1993 roku (odn. 2, 3) zaniechano tego rozróżnienia.

P-70.2 STARSZEŃSTWO RODNIKÓW I JONÓW

Jako klasy rodniki i jony są starsze niż kwasy i inne klasy w następującym porządku;

(1) rodniki;
(2) aniony;
(3) kationy

P-70.3 TWORZENIE NAZWY

Nazwy podstawnikowe i nazwy klasowo-funkcyjne rozciągają się na rodniki i jony oraz pokrewne związki. Macierzyste wodorki i macierzyste związki są wybierane i modyfikowane przez użycie odpowiednich przyrostków (nazywanych przyrostkami skumulowanymi) i przedrostków; tradycyjne końcówki są używane do opisu anionów pochodzących z kwasów i pokrewnych związków (patrz P-72.2.2.2). Nomenklatura di- i triwalencyjnych rodników ani nie wskazuje ani nie zakłada struktury elektronowej czy multipletowości spinu.

P-70.3.1 W Tabeli 7.1 wymienione są przyrostki, przedrostki i końcówki nazw rodników stosowane w nomenklaturze podstawnikowej. Są one również opisane w Tabeli 3.4.

Tablica 7.1 Przyrostki albo końcówki i przedrostki nazw rodników i jonów w nomenklaturze podstawnikowej

Operacja	Przyrostek albo końcówka	Przedrostek
Rodnik utworzony przez:		
utratę H•	yl (il)	ylo (ilo)
utratę 2 H• od jednego atomu od różnych atomów	yliden (iliden) diyl	
utratę 3 H• od jednego atomu od różnych atomów	ylidyn (ilidyn) triyl lub ylyliden (ilyliden)	
przyłączenie H•	hydryl	
Aniony utworzone przez:		
utratę H^+	id (yd) ian, in (yn) (końcówki)	
przyłączenie H^- przyłączenie elektronu	uid[1] elid[1]	
Kationy utworzone przez:		
utratę H^-	ylium	
przyłączenie H^+ utratę elektronu	ium elium[1]	

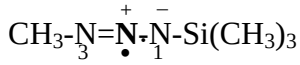
[1]Przyrostki ‘elid’ i ‘elium’ są zalecane do wskazywania modyfikacji macierzystego wodorku przez, odpowiednio, przyłączenie lub usunięcie jednego elektronu.

P-70.3.2 Podstawowe przedrostki zwielokrotniające stosuje się do wskazania wielokrotności przyrostków ‘yl (il)’, ‘yliden (iliden)’, ‘ylidyn (ilidyn)’, ‘id (yd)’, ‘uid’, ‘ium’, i przedrostka ‘ylo (ilo)’. Przedrostki zwielokrotniające ‘bis’, ‘tris’, etc. są stosowane przed przyrostkiem ‘ylium’ i przed zespolonymi przyrostkami takimi jak ‘aminium’, ‘olan’, etc.

P-70.3.3 W nazwach, przyrostki i końcówki są wymieniane w określonym, opisanym poniżej, porządku.

P-70.3.3.1 Kiedy w nazwie występują dwa lub więcej skumulowanych przyrostków, kolejność ich wymieniania jest odwrotna do porządku starszeństwa dla rodników i jonów jaką podano w P-70.2, to znaczy: ‘ium’, ‘ylium’, ‘id’, ‘uid’, ‘yl’, ‘yliden’, ‘ylidyn’.

Przykład:



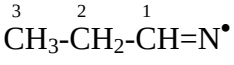
3-metylo-1-(trimetylosililo)triaz-2-en-2-ium-1-id-2-yl (PIN)

P-70.3.3.2 Kiedy występują przyrostki funkcyjne i skumulowane, kolejność ich wymieniania jest opisana określonymi regułami.

P-70-3.3.2.1 Przyrostek skumulowany może być dodany do funkcyjnego przyrostka z utworzeniem określonego przyrostka zespolonego (patrz P-71.3.2).

Przykłady:

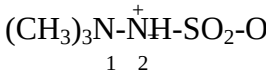
metanoaminyl (PIN)
metyloazanyl
nazwa tradycyjna: metyloamino



propan-1-iminyl (PIN)
propylidenoazanyl

P-70.3.3.2.2 W jonach obojnaczych (zwiterjonach) przedrostki zespolone poprzedzają przedrostki funkcyjne i mają pierwszeństwo przy wyborze najniższych lokantów.

Przykład:



trimetylohydrazyn-1-ium-2-sulfonian (PIN)

P-70.4 OGÓLNE REGUŁY WYBORU PREFEROWANYCH NAZW

Koncepcja preferowanych nazw IUPAC w zastosowaniu do rodników i jonów opiera się na następujących zasadach.

(1) do utworzenia preferowanej nazwy IUPAC stosuje się nomenklaturę podstawnikową opierającą się na nomenklaturach karbanów i heteranów oraz zestawie przyrostków i przedrostków przeznaczonych do systemowego wyrażenia formalnej operacji potrzebnej do powstania rodników i jonów. W konsekwencji, preferowana nazwa IUPAC rodnika nie musi być taka sama jak preferowany przedrostek.

(2) niektóre nazwy są zachowane jako preferowane nazwy IUPAC, zwłaszcza skrócone nazwy przedrostków podstawnikowych pochodzących od alkoholi i pokrewnych związków hydroksylowych, takie jak metoksylan, etoksylan, etc., i metoksyl, etoksyl, etc.

(3) niektóre nazwy są zachowane do stosowania jedynie w ogólnej nomenklaturze, na przykład ‘kationy oniowe’ takie jak amonium i sulfonium, karben $CH_2^{2\bullet}$; amid NH_2^- i acetyl CH_3-C(O).

(4) nazwy klasowo-funkcyjne stosujące nazwy klas takich jak kation, anion, etc. mogą być używane w ogólnej nomenklaturze, ale preferowanymi nazwami IUPAC są nazwy tworzone systematycznie albo nazwy zachowane, na przykład, ‘metylium’ a nie ‘kation metylowy’ dla CH_3^+; ‘acetylium’ a nie ‘kation acetylowy’ dla CH_3-$C(O)^+$; ‘etanid’ a nie ‘anion etylowy’ dla CH_3-CH_2^- i ‘metyliumyl’ a nie ‘kationorodnik’ metylowy’ dla $CH_4^{\bullet+}$.

P-71 RODNIKI

P-71.1 Ogólna metodologia
P-71.2 Rodniki utworzone z macierzystych wodorków
P-71.3 Centra rodnikowe na grupach charakterystycznych
P-71.4 Zespoły rodników macierzystych
P-71.5 Przedrostki wskazujące rodniki
P-71.6 Porządek wymieniania i starszeństwa przyrostków ‘yl’, ‘yliden’ i ‘ylidyn’
P-71.7 Wybór struktury macierzystej

P-71.1 OGÓLNA METODOLOGIA

Rodniki nazywa się modyfikując nazwy macierzystego wodorku w celu zaznaczenia oderwania lub przyłączenia jednego lub większej liczby atomów wodoru H•. Po raz pierwszy zalecane jest zaznaczanie przyłączenia pojedynczego atomu wodoru. Te dwie operacje są wyrażane za pomocą przyrostków.

Przyrostki ‘yl’ ($H^\bullet$), ‘yliden’ ($2H^\bullet$), ‘ylidyn’ ($3H^\bullet$) wskazują usunięcie atomów wodoru, operację oderwania.

Przyrostek ‘hydryl’ wskazuje operację dodawania, to znaczy przyłączenie pojedynczego atomu wodoru.

Przedrostek ‘ylo’ oznacza usunięcie ‘$H^\bullet$’ z podstawnika, operację oderwania.

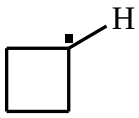
P-71.2 RODNIKI POCHODZĄCE Z MACIERZYSTYCH WODORKÓW

P-71.2.1 Rodniki monowalencyjne

P-71.2.1.1 Rodnik formalnie utworzony w wyniku usunięcia jednego atomu wodoru z mononuklearnego macierzystego wodorku pierwiastka grupy 14, z końcowego atomu nierozgałęzionego acyklicznego węglowodoru lub z dowolnej pozycji pierścienia monocyklicznego nasyconego węglowodoru nazywa się zamieniając końcówkę ‘an’ w systematycznej nazwie macierzystego wodorku na ‘yl’.

Przykłady:

$^\bullet CH_3$	$^\bullet CH_2$-CH_2-CH_3	$^\bullet GeH_3$
metyl (PIN)	propyl (PIN)	germyl (nazwa wstępnie wybrana)

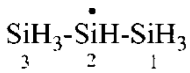


cyklobutyl (PIN)

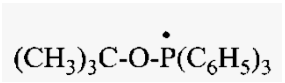
P-71.2.1.2 Rodnik formalnie utworzony przez usunięcie jednego atomu wodoru z dowolnej pozycji macierzystego wodorku lub modyfikowanego macierzystego wodorku, innego niż opisane powyżej w P-71.2.1.1, nazywa się dodając przyrostek ‘yl’ do nazwy macierzystego wodorku. Jako wyjątek, preferowaną nazwą IUPAC dla HO• jest ‘hydroksyl’, nazwa zachowana, w miejsce systematycznej nazwy oksydanyl’ (patrz odn. 12, IR-6.4.7); preferowaną nazwą IUPAC dla HOO• jest zachowana nazwa ‘hydroperoksyl’, w miejsce nazwy systematycznej ‘dioksydanyl’. Te zachowane nazwy nie mogą być używane dla podstawionych grup, na przykład, CH_3-O• nazywa się ‘metoksyl’ albo ‘metyloksydanyl’ a nie ‘metylohydroksyl’ (patrz P-71.3.5).

Przykłady:

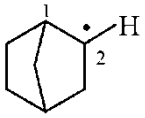
$HS^{\bullet}$	$H_2N^{\bullet}$	$H_2B^{\bullet}$
sulfanyl (nazwa wstępnie wybrana)	azanyl (nazwa wstępnie wybrana) aminyl (nazwa tradycyjna: amino)	boranyl (nazwa wstępnie wybrana) (nie boryl)



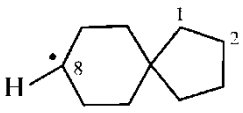
trisilan-2-yl (nazwa wstępnie wybrana)



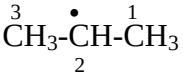
tert-butoksy(trifenylo)-λ^5- fosfanyl (PIN)
[(2-metylopropan-2-yl)oksy]trifenylo-λ^5-fosfanyl
(1,1-dimetyloetoksy)trifenylo-λ^5-fosfanyl



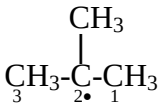
bicyklo[2.2.1]heptan-2-yl (PIN)



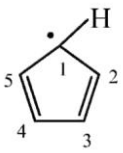
spiro[5.5]dekan-8-yl (PIN)



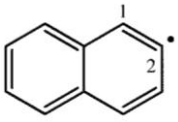
propan-2-yl (PIN)
1-metyloetyl
izopropyl



2-metylopropan-2-yl (PIN)
1,1-dimetyloetyl
tert-butyl [patrz P-70.4(2)]



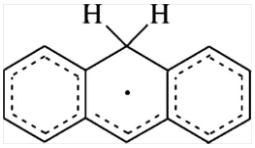
cyklopenta-2,4-dien-1-yl (PIN)



naftalen-2-yl (PIN)

P-71.2.1.3 Rodnik utworzony w wyniku addycji pojedynczego atomu wodoru, H•, kiedy pozycja atomu wodoru musi być określona można wskazać za pomocą przyrostka ‘hydryl’.

Przykład:



antracen-9-hydryl (PIN)
antracen-9-iumelid (patrz P-70.3.1)
antracen-9-eliumuid (patrz P-70.3.1)
2,9-dihydroantracen-2-yl

P-71.2.2 Rodniki diwalencyjne i triwalencyjne

Nazwy diwalencyjnych i triwalencyjnych rodników tworzy się podstawnikowo używając na dwa sposoby przyrostki ‘yliden’ i ‘ylidyn’:

(1) zamieniając końcówki ‘an’ w nazwach mononuklearnych macierzystych wodorków pierwiastków z grupy 14, albo z końcowego atomu nierozgałęzionego acyklicznego węglowodoru, albo z dowolnej pozycji pierścienia monocyklicznego nasyconego węglowodoru na odpowiedni przyrostek (odpowiednio do P-71.2.1.1).
(2) dodając do nazwy macierzystego wodorku w dowolnej pozycji (odpowiednio do P-71.2.1.2) odpowiedniego przyrostka, różnego od opisanych w P-71.2.1.1.

Te systematyczne nazwy są preferowane względem nazw zachowanych, które mogą być stosowane w ogólnej nomenklaturze.

P-71.2.2.1 Specyficzne metody i zachowane nazwy

Rodnik formalnie utworzony przez usunięcie dwóch atomów wodoru z jednego atomu szkieletu mononuklearnego macierzystego wodorku pierwiastka grupy 14, albo z jednego końcowego atomu szkieletu nierozgałęzionego acyklicznego węglowodoru, albo z jednego szkieletowego atomu pierścienia monocyklicznego nasyconego węglowodoru nazywa się zamieniając końcówki ‘an’ w systematycznej nazwie macierzystego wodorku na przyrostek ‘yliden’ lub ‘diyl’. Przyrostek ‘ylidyn’ lub ‘triyl’ jest używany do nazywania rodników formalnie utworzonych przez usunięcie trzech atomów wodoru z jednego atomu szkieletu mononuklearnego macierzystego wodorku pierwiastka grupy 14, albo z jednego końcowego atomu szkieletu nierozgałęzionego acyklicznego węglowodoru.

Nazwy systematyczne są preferowanymi nazwami IUPAC. Zachowane nazwy: karben lub metylen, nitren lub aminylen, sililen i karbyn, można używać w ogólnej nomenklaturze, z pełnym podstawieniem

Nazwy systematyczne i zachowane nie wskazują na określoną konfigurację elektronową. Jeśli zachodzi potrzeba, takie rozróżnienie może być dokonane przez użycie osobnego słowa takiego jak singlet lub tryplet albo wyrażenia opisowego. Stan dwóch niesparowanych elektronów w strukturze jest równoznaczne z podanym w Red Book jako $CH_2^{2\bullet}$ (patrz odn. 12, IR-6.4.7).

Przykłady:

$H_2C^{2\bullet}$

metyliden (PIN)
karben
metylen

$H_2Si^{2\bullet}$

sililiden (nazwa wstępnie wybrana)
silanodiyl (nie sililen)

$HC^{3\bullet}$

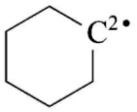
metylidyn (PIN)
metanotriyl
karbyn

$(C_6H_5)_2C^{2\bullet}$

difenylometyliden (PIN)
difenylometanodiyl
difenylokarben
difenylometylen

$C_6H_5\text{-}CH_2\text{-}SiH^{2\bullet}$

benzylosililiden (PIN)
benzylosilanodiyl



cykloheksyliden (PIN)
cykloheksano-1,1-diyl

$CH_3C^{3\bullet}$

etylidyn (PIN
etano-1,1,1-triyl
(nie metylokarbyn)

P-71.2.2.2 Ogólne metody

Z wyjątkiem rodników nazwanych w P-71.2.2.1, nazwy diwalencyjnych i triwalencyjnych rodników utworzonych przez usunięcie dwóch albo trzech atomów wodoru z jednej pozycji macierzystego wodorku tworzy się dodając do nazwy macierzystego wodorku przyrostki, odpowiednio, ‘yliden’ lub ‘diyl’ i ‘ylidyn’ lub ‘triyl’. Nazwa azanyliden jest wstępnie wybraną nazwą dla $HN^{2\bullet;}$ nitren lub aminyliden są nazwami zachowanymi do stosowania w ogólnej nomenklaturze.

Przykłady:

$HN^{2\bullet}$

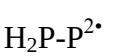
azanyliden (nazwa wstępnie wybrana)
azanodiyl
aminyliden
nitren

$H_2P^{3\bullet}$

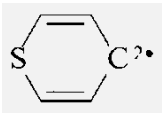
λ^5-fosfanylidyn (nazwa wstępnie wybrana
λ^5-fosfanotriyl
fosforanylidyn
fosforanotriyl

$H_2N\text{-}N^{2\bullet}$

hydrazynyliden (nazwa wstępnie wybrana)
diazanyliden
hydrazyno-1,1-diyl
diazano-1,1-diyl
(nazwa tradycyjna: hydrazono)
(nie aminonitren)



difosfanyliden (nazwa wstępnie wybrana)
difosfano-1,1-diyl

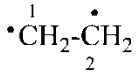


4*H*-tiopiran-4-yliden (PIN)
4*H*-tiopirano-4,4-diyl

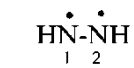
P-71.2.3 Wielokrotne centra rodnikowe (polirodniki)

Polirodniki zawierające dwa lub więcej centrów rodnikowych, formalnie utworzone w wyniku usunięcia dwóch lub większej liczby atomów wodoru z każdego z dwóch lub większej liczby różnych atomów szkieletu macierzystego wodorku, nazywa się dodając do nazwy macierzystego wodorku kombinację przyrostka ‘yl’ dla monowalencyjnego centrum rodnikowego, ‘yliden’ dla diwalencyjnego centrum rodnikowego i ‘ylidyn’ dla triwalencyjnego centrum rodnikowego z odpowiednimi liczbowymi przedrostkami wskazującymi liczbę każdego rodzaju centrów rodnikowych. Wszystkie podstawniki, włączając grupy charakterystyczne, wymienia się jako przedrostki. Zastosowanie powyższych reguł prowadzi do preferowanych nazw IUPAC .

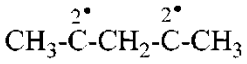
Przykłady:



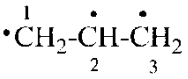
etano-1,2-diyl (PIN)
(nazwa tradycyjna etylen)



hydrazyno-1,2-diyl
(nazwa wstępnie wybrana)
diazano-1,2-diyl

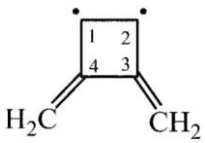


pentano-2,4-diyliden (PIN)

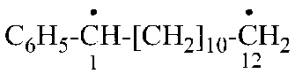


propano-1,2,3-triyl (PIN)

benzeno-1,4-diyl (PIN)
{nazwy tradycyjne: *p*-fenylen,
1,4-fenylen [patrz P-70.4.(1)]}



3,4-dimetylidenocyklobutano-1,2-diyl
(PIN)



1-fenylododekano-1,12-diyl (PIN)

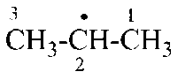
P-71.2.4 Acykliczne rodniki utworzone przez usunięcie jednego lub więcej atomów wodoru z nie końcowej pozycji w łańcuchu nazywa się na dwa sposoby:

(1) wymieniając tą nie końcową pozycję w łańcuchu

(2) podstawiając macierzysty rodnik, który ma wolną walencyjność (walencyjności) na końcu łańcucha.

Preferowane nazwy IUPAC tworzy się za pomocą metody (1) . Jeśli zachodzi potrzeba główny łańcuch wybiera się metodą wskazaną w P-46 dla podstawników.

Przykład:



propan-2-yl (PIN)
1-metyloetyl

P-71.2.5 λ-Konwencja

Diwalencyjne i triwalencyjne centra rodnikowe w macierzystym wodorku, formalnie utworzone przez usunięcie dwóch lub trzech atomów wodoru z tego samego atomu szkieletowego w jego standardowym stanie walencyjnym, można opisać za pomocą λ-konwencji. (patrz P-14.1). Za lokantami centrów rodnikowych umieszczany jest symbol λ^n w którym 'n' oznacza wiązalność atomu szkieletu (patrz P-14.1). Ta metoda stosowana jest tylko w ogólnej nomenklaturze.

Przykłady:

$Cl_2C^{2\bullet}$

dichloro-λ^2-metan
dichlorometyliden (PIN)
dichlorometanodiyl

$FC^{3\bullet}$

fluoro-λ^1-metan
fluorometylidyn (PIN)
fluorometanotriyl

$C_6H_5\text{-}N^{2\bullet}$

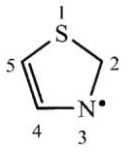
fenylo-λ^1-azan
benzenoaminyliden (PIN)
fenyloazanodiyl

P-71.2.6 'Dodany wskazany atom wodoru'

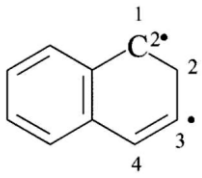
W macierzystym wodorku mancude, w pozycji, w której jest za mała liczba atomów wodoru żeby zastosować bezpośrednio zalecenia dotyczące używania 'yl' lub 'yliden' podane w P-71.2.1 P-71.2.2, centrum rodnikowe formalnie tworzy się z pochodnej dihydro cyklicznego macierzystego wodorku. Taki rodnik może być opisany także przez zastosowanie zasady: 'dodany wskazany atom wodoru' (patrz P-14.7 i P-58.2). W tej metodzie pochodną 'hydro' opisuje się przez wskazanie atomu wodoru z pary dihydro, który pozostaje po utworzeniu centrum rodnikowego. W tym celu wymienia się pisaną kursywą dużą literę *H* i lokant atomu szkieletu, do którego przyłączony jest atom wodoru, a oba symbole umieszcza się w nawiasach i lokuje w nazwie odpowiedniego macierzystego wodorku bezpośrednio za lokantem centrum rodnikowego.

Nazwy utworzone metodą 'dodany wskazany atom wodoru' są preferowane w stosunku do nazw z przedrostkami 'hydro' (patrz P-58.2.5).

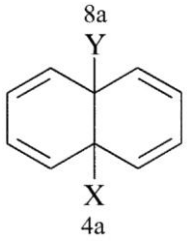
Przykłady:



1,3-tiazol-3(2*H*)-il (PIN)
2,3-dihydro-1,3-tiazol-3-il
(nierozłączne przedrostki hydro, patrz P-58.2.5)

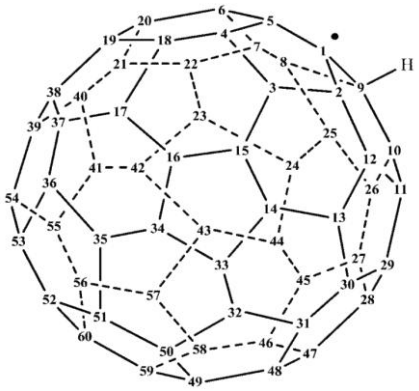


naftalen-3-yl-1(2*H*)-yliden (PIN)
1,2-dihydronaftalen-3-yl-1-yliden
(nierozłączne przedrostki hydro, patrz P-58.2.5)



X = • ; Y = H naftalen-4a(8a*H*)-yliden (PIN)
1,2-dihydronaftalen-3-yl-1-yliden
(nierozłączne przedrostki hydro, patrz P-58.2.5)

X = • ; Y = • naftaleno-4a,8a-diyl (PIN)
4a,8a-dihydronaftaleno-4a,8a-diyl
(nierozłączne przedrostki hydro, patrz P-58.2.5)



(C_{60}-*Ih*)[5,6]fulleren-1(9*H*)-yl (PIN)
1,9-dihydro(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren-1-yl
(nierozłączne przedrostki hydro, patrz P-58.2.5)

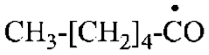
P-71.3 CENTRA RODNIKOWE W GRUPACH CHARAKTERYSTYCZNYCH

P-71.3.1 Rodniki acylowe

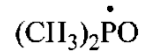
Rodniki acylowe, to znaczy rodniki z przynajmniej jednym atomem chalkogenu lub azotu przyłączonym do centrum rodnikowego poprzez (formalnie) podwójne wiązanie, które można uznać jako za formalnie powstałe w wyniku usunięcia grupy hydroksylowej z grup charakterystycznych kwasu, nazywa się pomijając słowo kwas i zamieniając końcówki ‘owy’ albo ‘karboksylowy’ w nazwie kwasu na ‘oil’ lub ‘yl’ (‘il’) lub ‘karbonyl’ według metody tworzenia nazw grup acylowych (patrz P-65.1.7). W ogólnej nomenklaturze można używać podstawników wskazywanych przedrostkami takimi jak ‘okso’, ‘tiokso’, ‘sulfanyliden’, etc.

Zespolone rodniki acylowe utworzone z acyklicznych macierzystych wodorków i przedrostków podstawników takich jak ‘okso’, ‘tiokso’, ‘sulfanyliden’ i ‘imino’ można stosować w ogólnej nomenklaturze; są one używane w nomenklaturze indeksów CAS

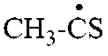
Przykłady:



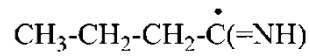
heksanoil (PIN)
1-oksoheksyl



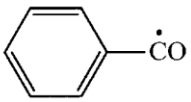
dimetylofosfinoil (PIN)
dimetylo(okso)-λ^5-fosfanyl



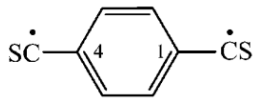
etanotioil (PIN)
1-sulfanylidenoetyl
1-tioksoetyl



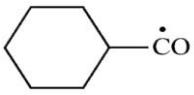
butanoimidoil (PIN)
1-iminobutyl



benzoil (PIN)
benzenokarbonyl



benzeno-1,4-disulfinyl (PIN)
1,4-fenylenobis(okso-λ^4-sulfanyl)



cykloheksanokarbonyl (PIN)
cykloheksylo(okso)metyl

benzeno-1,4-dikarbonyl (PIN)
tereftaloil
1,4-fenylenobis(oksometyl)

P-71.3.2 Rodnik formalnie utworzony w wyniku usunięcia atomów wodoru z grup charakterystycznych: aminowej, iminowej i amidowej nazywa się, jak tu pokazano, dodając do podstawowego przyrostka kumulacyjnego przyrostek ‘yl’ lub ‘yliden’. Ta metoda jest preferowana w porównaniu do metod używających nazw macierzystych takich jak ‘azanyl’ i ‘nitren’ albo modyfikatora funkcji ‘imidyl’ w nomenklaturze klasowo-funkcyjnej.

Tabela 7.2. Przyrostki dla rodników amin, imin i amidów

$-NH_2$	amina (przyrostek wstępnie wybrany)		aminyl (przyrostek wstępnie wybrany)
			aminyliden (przyrostek wstępnie wybrany)

=NH	imina (przyrostek wstępnie wybrany)	$=N^{\bullet}$	iminyl (przyrostek wstępnie wybrany)
-(C)O-NH_2	amid (preferowany przyrostek)	$-(C)O-\dot{N}H$	amidyl (preferowany przyrostek)
		$-(C)O-N^{2\bullet}$	amidyliden (preferowany przyrostek)
-CO-NH_2	karboksyamid (preferowany przyrostek)	$-CO-\dot{N}H$	karboksyamidyl (preferowany przyrostek)
		$-CO-N^{2\bullet}$	karboksyamidyliden (preferowany przyrostek)

Przykłady:

$^{1}C_6H_5-\dot{N}$

metanoaminyl (PIN)
metyloazanyl
metyloaminy
(tradycyjnie: metyloamino)

$^{3}CH_3-^{2}CH_2-^{1}CH=N^{\bullet}$

propano-1-iminyl
propylidenoazanyl

$C_6H_5-\dot{N}H$

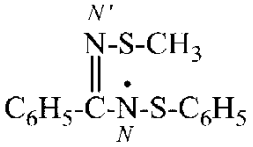
benzenoaminyl (PIN)
fenyloaminyl
fenyloazanyl
(tradycyjnie: fenyloamino)
(nie anilino)

$(CH_3)_3P=N^{\bullet}$

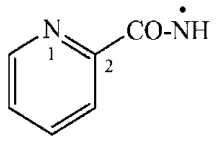
trimetylo-λ^5-fosfanoiminyl (PIN)
imidyl trimetylofosfanu

$HCO-\dot{N}H$

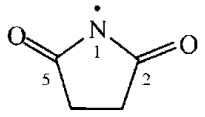
formamidyl
formyloazanyl
formyloaminyl



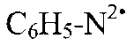
N′-(metylosulfanylo)-*N*-(fenylosulfanylo)benzenokarboksyimidoamidyl (PIN)



pirydyno-2-karboksyamidyl (PIN)



2,5-dioksopirolidyn-1-yl (PIN)
sukcynoimidyl



benzenoaminyliden (PIN)
fenylonitren
fenyloaminylen

acetoamidyliden (PIN)
acetylonitren

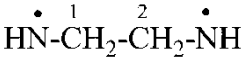
P-71.3.3 Rodniki poliaminowe, poliiminowe i poliamidowe

Polirodniki z rodnikowymi centrami utworzonymi tak samo, ale ulokowanymi na dwóch lub większej liczbie grup charakterystycznych: aminowej, iminowej lub amidowej, nazywa się na dwa sposoby:

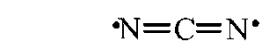
(1) używając przyrostki (patrz P-71.3.2) wskazujące usunięcie jednego atomu wodoru z każdej grupy charakterystycznej i przyrostki zwielokrotniające ‘bis’, ‘tris’ etc.:
(2) stosując nomenklaturę multiplikującą opartą na macierzystych rodnikach ‘azanyl’ i ‘azanyliden’

Aby uniknąć niejasności, nazwa ‘aminyl’ jest zarezerwowana do wskazywania przyrostka w nomenklaturze podstawnikowej; macierzysty rodnik ‘azanyl’ stosuje się w nomenklaturze multiplikacyjnej. Jeśli przedrostki opisane w P-71.3.2 są dostępne, metoda (1) prowadzi do preferowanych nazw IUPAC.

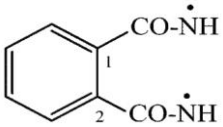
Przykłady:



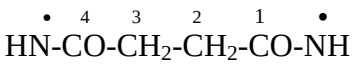
etano-1,2-diylobis(aminyl) (PIN)
etano-1,2-diylobis(azanyl)



(1) metanobis(iminyl) (PIN)
(2) metanodiylidenobis(azanyl)



(1) benzeno-1,2-bis(karboksyamidyl) (PIN)
(2) benzeno-1,2-dikarbonylobis(azanyl)



(1) butanobis(amidyl) (PIN)
(2) butanodioilobis(azanyl)

(1) heksanobis(amidyliden) (PIN)
(2) heksanodioilobis(azanyliden)
heksanodioilobis(aminyliden)
heksanodioilobis(nitren)

P-71.3.4 Rodnik formalnie utworzony w wyniku usunięcia atomu wodoru z grupy hydroksylowej (lub chalkogenowego analogu) kwasu albo z hydroksylowej grupu charakterystycznej nazywa się na dwa sposoby:

(1) addytywnie, używając określeń ‘oksyl’ lub ‘peroksyl’ pochodzących z terminów ‘oksy’ lub ‘peroksy’(nie dioksy);

(2) przez podstawienie, odpowiednim podstawnikiem, macierzystych rodników: ‘oksydanyl’ (nazwa wstępnie wybrana) dla HO• albo ‘dioksydanyl’ (nazwa wstępnie wybrana) dla HOO•.

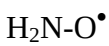
Nazwy metoksyl, etoksyl, propoksyl, butoksyl, fenoksyl i aminooksyl, które można traktować jako nazwy skrócone nazw utworzonych systematycznie, takich jak ‘metanyloksyl’ lub ‘metyloksyl’, są zachowane i należą do preferowanych nazw IUPAC (nazwy metoksy, etoksy, etc. patrz P-63.2.2.2).

Preferowane nazwy IUPAC powstają w metodzie (1).

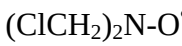
Przykłady:

(1) metoksyl (PIN)
(2) metylooksydanyl

(1) (chloroacetylo)oksyl (PIN)
(2) chloroacetoksyl
(3) (chloroacetylo)oksydanyl



aminoksyl (nazwa wstępnie wybrana, skrót od aminooksyl)



(1) bis(chlorometylo)aminoksyl (PIN)
(2) [bis(chlorometylo)amino]oksydanyl

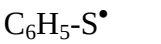
(1) heksanoiloperoksyl (PIN)
(2) heksanoilodioksydanyl

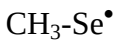
(1) butoksyl (PIN)
(2) butylooksydanyl

(1) butanoilooksydanyl (PIN)
(2) butanoilooksyl

Analogi chalkogenowe nazywa się na podstawie wstępnie wybranych nazw macierzystych rodników takich jak : ‘sulfanyl’, ‘selanyl’, ‘disulfanyl’, etc.

Przykłady:





fenylosulfanyl (PIN)
(nie benzenosulfenyl, kwasy sulfenowe nie są już uznawane; patrz P-56.2)

metyloselanyl (PIN)

CH_3-C(CH_3)$_2$-SS$^\bullet$

tert-butylodisulfanyl (PIN)
(2-metylopropan-2-ylo)disulfanyl

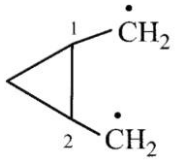
$ClCH_2$-CS-S$\bullet$

(chloroetanotioilo)sulfanyl (PIN)

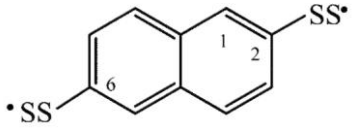
P-71.4 ZESPOŁY MACIERZYSTYCH RODNIKÓW

Polirodniki z rodnikowymi centrami identycznie utworzonymi z tego samego macierzystego wodorku albo takiej samej grupy charakterystycznej (z wyjątkiem rodników poliacylowych i poliamidowych opisanych, odpowiednio, w P-71.3.1 i P-71.3.4), ale ulokowanymi w różnych częściach struktury nazywa się, jeśli to możliwe, według zasad nomenklatury zespołów identycznych elementów połączonych multiwalencyjnymi podstawnikami (patrz P-15.3).

Przykłady:



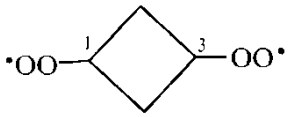
(cyklopropano-1,2-diylo)dimetyl (PIN)



(naftaleno-2,6-diylo)bis(disulfanyl) (PIN)

$\bullet$O-C(CH_3)$_2$-CH_2-C(CH_3)$_2$-O$\bullet$

(1) (2,4-dimetylopentano-2,4-diylo)bis(oksyl) (PIN)
(1,1,3,3-tetrametylopropano-1,3-diylo)bis(oksyl)
(2) (2,4-dimetylopentano-2,4-diylo)bis(oksydanyl)



(1) (cyklobutano-1,3-diylo)bis(peroksyl) (PIN)
(2) (cyklobutano-1,3-diylo)bis(dioksydanyl)

P-71.5 PRZEDROSTKI WSKAZUJĄCE RODNIKI

Obecność centrum rodnikowego w podstawniku, który ma być wskazany przedrostkiem, jest wyrażana na dwa sposoby:

(1) przez użycie przedrostka ‘ylo’ (ilo’) wskazującego oderwanie atomu wodoru z podstawnika, na przykład, ‘-ylometyl’ dla –CH_2•;
(2) przez skumulowanie przedrostków, na przykład, ‘oksylokarbonyl dla –CO-O•.

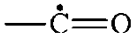
Ten przedrostek jest nierozłącznym przedrostkiem dołączonym do tworzonego zwykłymi metodami przedrostka macierzystego podstawnika. Obecność dwóch lub więcej centrów rodnikowych w podstawniku wskazanym jako przedrostek albo usunięcie dwóch lub więcej atomów wodoru z podstawnika wymienianego jako przedrostek wskazuje się odpowiednimi przedrostkami zwielokrotniającymi, ‘di’, ;tri’, etc.

Nazwa ‘oksyl’ jest zachowana jako wstępnie wybrany przedrostek dla -O•.

Przykłady:

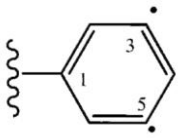
ylometyl (preferowany przedrostek)

oksyl (wstępnie wybrany przedrostek)
ylooksydanyl
(nie ylohydroksy)



yloformyl (preferowany przedrostek)

oksylokarboksyl (preferowany przedrostek)
(ylooksydanylo)formyl



3,5-diylofenyl (preferowany przedrostek)

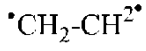
yloamino (wstępnie wybrany przedrostek)
yloazanyl

[4-(1,1-diyloetylo)fenylo]metyl (preferowany przedrostek)

P-71.6 PORZĄDEK WYMIENIANIA I STARSZEŃSTWA PRZYROSTKÓW ‘YL’, ‘YLIDEN’ I ‘YLIDYN’

Przyrostki ‘yl’ (‘il’), ‘yliden’ i ‘ylidyn’, jeżeli można je zastosować, są wymieniane w nazwie w tym porządku; najniższe lokanty przypisuje się rodnikom jako zbiorowi a następnie w porządku ‘yl’, ‘yliden’ i ‘ylidyn’. Porządek wymieniania jest taki sam jak stosowany przy nazywaniu podstawników (patrz P-29.3.2.2).

Przykład:



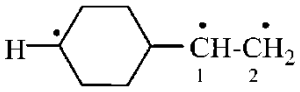
etan-1-yl-2-yliden (PIN)

P-71.7 WYBÓR MACIERZYSTEGO RODNIKA

Kiedy konieczny jest wybór macierzystego rodnika, stosowane są następujące kryteria, w podanym porządku, aż do osiągnięcia rozstrzygnięcia.

(a) Maksymalna liczba dowolnego rodzaju centrów rodnikowych w pojedynczej macierzystej strukturze;

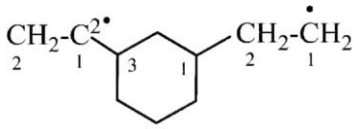
Przykład:



1-(4-ylocykloheksylo)etano-1,2-diyl (PIN)

(b) Maksymalna liczba centrów rodnikowych ‘yl’, następnie centra rodnikowe ‘yliden’;

Przykład:



2-[3-(1,1-diyloetylo)cykloheksylo]etyl (PIN)

(c) Maksymalna liczba centrów rodnikowych na atomach szkieletu wcześniej wymienianych w porządku starszeństwa klas: N > P > As > Pb > Al > Ga > In > Tl > O > S > Se > Te > C (patrz P.44.1.2)

Obecnie porządek starszeństwa rodników odpowiada porządkowi starszeństwa klas, a nie porządkowi przedrostków zamiany szkieletu (‘a’) jaki używano w RC-81.3.3.2, odn. 3.

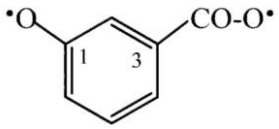
Przykład:

•CH_2-$C(CH_3)_2$-O•
(2-metyl-1-ylopropan-2-ylo)oksyl (PIN)
(1,1-dimetyl-2-yloetylo)oksydanyl

(d) Jeśli zachodzi potrzeba, dalszego wyboru dokonuje się stosując ogólne kryteria dotyczące łańcuchów i pierścieni, podane dla związków obojętnych w rozdziałach 1–6

(1) maksymalna liczba centrów rodnikowych według porządku przyrostków (patrz P-33).

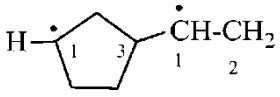
Przykład:



(3-oksylobenzoilo)oksyl (PIN)
[3-(ylooksydanylo)benzoilo]oksydanyl

(2) pierścienie są starsze niż łańcuchy.

Przykład:



3-(1-yloetylo)cyklopentyl (PIN)

P-72 ANIONY

P-72.1 Ogólna metodologia
P-72.2 Aniony utworzone przez usunięcie hydronów
P-72.3 Aniony utworzone przez addycję hydrydów (jonów wodorkowych)
P-72.4 Nomenklatura zamienna szkieletu
P-72.5 Wielokrotne centra anionowe
P-72.6 Centra anionowe jednocześnie w związku macierzystym i podstawniku
P-72.7 Wybór anionowej struktury macierzystej
P-72.8 Przyrostki ‘id’ i ‘uid’ oraz λ-konwencja

P-72.1 OGÓLNA METODOLOGIA

Aniony nazywa się na dwa sposoby:
(1) przez użycie przyrostków i końcówek;
(2) nomenklaturą klasowo-funkcyjną.

Metoda (1) prowadzi do preferowanych nazw IUPAC. Niektóre nazwy i niektóre nazwy skrócone są zachowane jako preferowane nazwy IUPAC i do stosowania w ogólnej nomenklaturze.
Używane są następujące przyrostki:

‘id’ (preferowany przyrostek; odpowiada usunięciu hydronu, H^+),
‘uid’ (preferowany przyrostek, odpowiada addycji hydrydu, H^-),
‘elid’ (preferowany przyrostek, odpowiada addycji elektronu).

Końcówki ‘an’ (‘ian’) i ‘in’ (‘yn’) są używane do wskazania usunięcia hydronu z grupy –OH kwasów i związków hydroksylowych.

Nomenklatura klasowo-funkcyjna opiera się na nazwie klasowej ‘anion’ w połączeniu z nazwą odpowiedniego rodnika (niekoniecznie z nazwą odpowiedniego podstawnika).

P-72.2 ANIONY UTWORZONE PRZEZ ODERWANIE HYDRONÓW

P-72.2.1 Nomenklatura klasowo-funkcyjna
P-72.2.2 Nomenklatura systematyczna

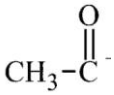
P-72.2.1 Nomenklatura klasowo-funkcyjna

Do opisu związków anionowych w ogólnej nomenklaturze może być użyta nomenklatura klasowo-funkcyjna. Anion, który formalnie można traktować jako powstający w wyniku addycji elektronu do rodnika może być także nazwany przez dodanie nazwy klasy ‘anion’, jako osobnego słowa, do nazwy podstawnika. Nazwy tworzy się przez użycie nazw odpowiednich rodników (niekoniecznie nazw podstawników) i nazwy klasy ‘anion’ jako osobnego słowa. Przedrostki zwielokrotniające ‘di’, ‘tri’, etc. dodaje się do nazwy klasy w celu wskazanie krotności anionu. Ten

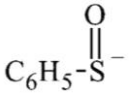
typ nomenklatury jest ograniczony do anionów mających centra anionowe w tej samej strukturze. Nazwy systematyczne (patrz P-72.2.2) są preferowanymi nazwami IUPAC.

Przykłady:

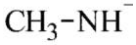
anion metylu
metanid (PIN)



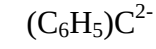
anion acetylu
1-oksoetan-1-id (PIN)



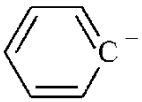
anion benzenosulfinylu
okso(fenylo)-λ^4-sulfanid
(PIN)



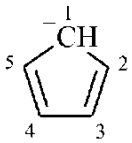
anion metanoaminylu
metanoaminid (PIN)



dianion difenylometylidenu
difenylometanodiid (PIN)



anion fenylu
benzenid (PIN)



anion cyklopenta-2,4-dien-ylu
cyklopenta-2,4-dien-1-id (PIN)
cyklopentadienid (patrz P-76.1)

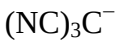
P-72.2.2 Nomenklatura systematyczna

P-72.2.2.1 Aniony utworzone z macierzystych wodorków i ich pochodne

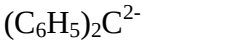
Anion formalnie utworzony w wyniku usunięcia jednego lub więcej hydronów z dowolnej pozycji obojętnego macierzystego wodorku korzystnie jest nazywać stosując przyrostek ‘id’. Do wskazania krotności stosuje się numeryczne przedrostki ‘di’, ‘tri’, etc.; lokanty określają pozycję ładunku ujemnego.

Nazwa ‘acetylid’ dla $^{-}C{\equiv}C^{-}$ jest zachowana tylko w ogólnej nomenklaturze.

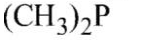
Przykłady:



tricyjanometanid (PIN)

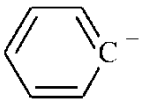


difenylomethanodiid (PIN)

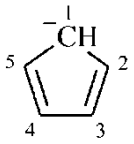


dimetylofosfanid (PIN)
dimetylofosfinid

metylidynosilanid (PIN)



benzenid (PIN)



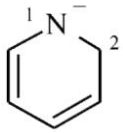
cyklopenta-2,4-dien-1-id (PIN)
cyklopentadienid (patrz P-76.1)

etynodiid (PIN)
acetylid

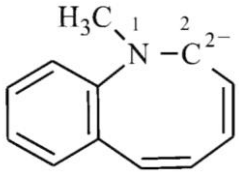
P-72.2.2.1.1 ‘Dodany wskazany atom wodoru’

Centrum anionowe w macierzystym wodorku mancude, w pozycji, w której jest za mała liczba atomów wodoru żeby zastosować bezpośrednio zalecenia dotyczące używania ‘id’ podane w P-72.2.2.1 formalnie tworzy się z pochodnej dihydro cyklicznego macierzystego wodorku. Taki anion może być opisany także przez zastosowanie zasady ‘dodany wskazany atom wodoru’ (patrz P-14.7). W tej metodzie pochodną ‘hydro’ opisuje się przez określenie atomu wodoru z pary dihydro, który pozostaje po utworzeniu centrum anionowego. W tym celu wymienia się pisaną kursywą dużą literę *H* i lokant atomu szkieletu, do którego przyłączony jest atom wodoru, a oba symbole umieszcza się w nawiasach i lokuje w nazwie odpowiedniego macierzystego wodorku bezpośrednio za lokantem centrum anionowego.
Nazwy utworzone metodą ‘dodany wskazany atom wodoru’ są preferowanymi nazwami IUPAC (patrz P-58.2).

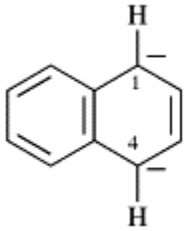
Przykłady:



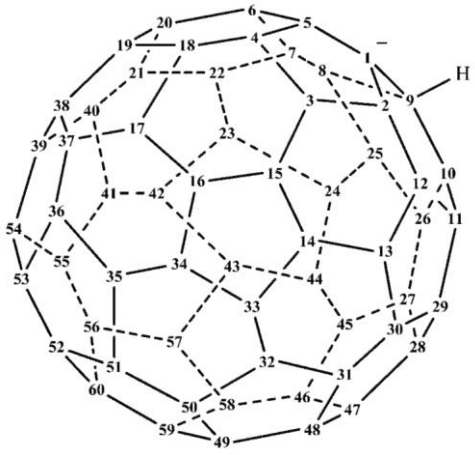
pirydyn-1(2*H*)-id (PIN
1,2-dihydropirydyn-1-id



1-metylo-1-benzoazocyno-2,2(1*H*)-diid (PIN)
1-metylo-1,2-dihydro-1-benzoazocyno-2,2-diid



1,4-dihydronaftaleno-1,4-diide (PIN)



(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren-1(9*H*)-id (PIN)
1,9-dihydro(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren-1-id

P-72.2.2.2 Nazwy anionów wywodzących się z grup charakterystycznych należą do preferowanych nazw IUPAC wówczas, gdy są nazwami zachowanymi lub utworzonymi w następujący sposób:

(1) dla kwasów, alkoholi i amin przez modyfikowanie nazw zwykle stosowanych w nomenklaturze podstawnikowej:
   (a) końcówki ‘an’ (‘ian’) lub 'in' (‘yn) do nazwania anionu pochodzącego z kwasu;
   (b) końcówkę –‘an’ do nazwania anionu pochodzącego z alkoholu;
   (c) przyrostka ‘aminid’ (utworzonego przez dodanie ‘id’ do przyrostka odpowiedniej aminy z pominięciem końcowego ‘a’ w ‘amina’, to znaczy, ‘amin(a) + id’ do nazwania anionów pochodzących z amin, w których ujemny ładunek jest na atomie azotu.

(2) przez odpowiednie wstępnie wybrane macierzyste nazwy anionowe w przypadku innych grup charakterystycznych, takich jak ‘azanid’ dla NH_2^-, ‘azanodiid’ dla NH^{2-}, oksydanid dla HO^-.

(3) amidów, hydrazydów i imidów nie nazywa się bezpośrednio metodą (1) tak jak amin i imin; powodem jest niewątpliwa dwuznaczność powodowana użyciem przyrostku ‘id’ na końcu nazw takich jak ‘amid’, ‘hydrazyd’, etc.

Metoda (2) prowadzi do nazw preferowanych. Także nazwa ‘amid’, która może być stosowana w ogólnej nomenklaturze do określenia macierzystego anionu NH_2^- prowadziłaby w pewnym stopniu do dwuznaczności. Natomiast użycie macierzy ‘azanid’ i ‘azanodiid’ eliminuje potencjalną dwuznaczność.

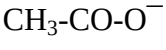
P-72.2.2.2.1 Aniony utworzone z kwasów
P-72.2.2.2.2 Aniony utworzone ze związków hydroksylowych
P-72.2.2.2.3 Aniony utworzone z amin i imin
P-72.2.2.2.4 Aniony utworzone z innych grup charakterystycznych

P-72.2.2.2.1 Aniony utworzone z kwasów

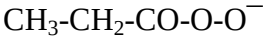
P-72.2.2.2.1.1 Preferowaną nazwę IUPAC anionu utworzonego przez usunięcie hydronu z atomu chalkogenu (O, S, Se i Te) grupy charakterystycznej kwasu lub peroksykwasu albo z funkcyjnego macierzystego związku tworzy się przez zamianę ‘kwas ..owy’ lub ‘kwas ..awy’ w nazwie kwasu na, odpowiednio, ‘an’ lub ‘ian’. Nazwy kwasów są opisane w P-65 i P-67.

Jest to zmiana w stosunku do zalecenia RC-83.1.6 (odn. 3), w którym peroksykwasy i ich chalkogenowe analogi modyfikowane przez zamianę funkcji były nazywane na podstawie anionowego macierzystego wodorku

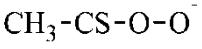
Przykłady:



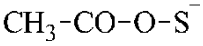
octan (PIN)



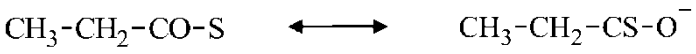
propanoperoksan (PIN)



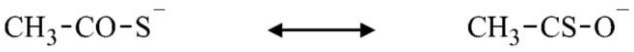
etanoperoksotian (PIN)
(etanotioilo)dioksydanid
(tioacetylo)dioksydanid



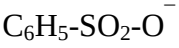
etano-*OS*-(tioperoksan) (PIN)
(acetyloksy)sulfanid
(nie acetoksysulfanid)



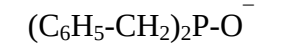
propanotian (PIN)



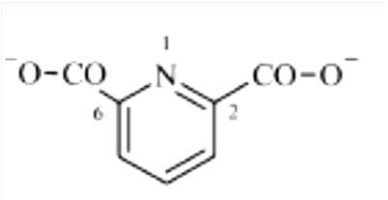
etanotian (PIN)



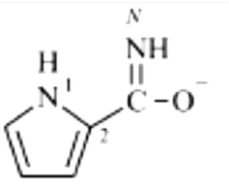
benzenosulfonian (PIN)



dibenzylofosfinin (PIN)



pirydyno-2,6-dikarboksylan (PIN)



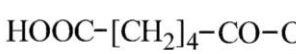
1*H*-pirolo-2-karboksyimidan (PIN)

P_72.2.2.2.1.2 Kwaśne estry kwasów organicznych

Preferowane nazwy IUPAC kwaśnych estrów ‘kwasów organicznych’ dyskutowane w

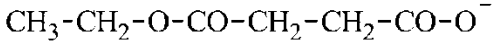
P-65 tworzy się podstawnikowo (patrz P-65.6.3.3.5) a nie metodą ‘sól wodoru’. Preferowane nazwy IUPAC kwaśnych estrów kwasów nieorganicznych omówionych w P-67.1.3.2 tworzy się metodą ‘sól wodoru’; patrz P-65.6.2.3 i P-65.6.3.3.5.

Przykłady:

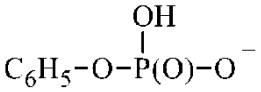


5-karboksypentanian (PIN)
heksanodian wodoru

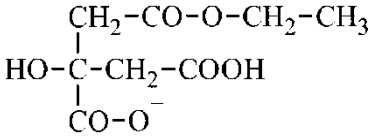
fenylofosfonian wodoru (PIN)
[nie hydroksy(fenylo)fosfinian; kwas fosfonowy jest starszy niż kwas fosfinowy]



4-etoksy-4-oksobutanian (PIN)
butanodian etylu
bursztynian etylu



fosforan fenylu- wodoru (PIN)



2-(karboksymetylo)-4-etoksy-2-hydroksy)-4-oksobutanian (PIN)
2-(karboksymetylo)-2-hydroksybutanodian 4-etylu
cytrynian 3-etylu-1- wodoru
2-(2-etoksy-2-oksoetylo)-2-hydroksybutanodian 4-wodoru

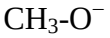
P-72.2.2.2.2 Aniony utworzone ze związków hydroksylowych

Anion utworzony w wyniku oderwania hydronu z grupy charakterystycznej hydroksylowej lub chalkogenowego analogu, który może być wskazany przyrostkami takimi jak ‘ol’, ‘tiol’, ‘peroksol’, etc. raczej nazywa się z użyciem przyrostków ‘olan’, ‘tiolan’, ‘peroksolan’, etc., utworzonych przez dodanie końcówki ‘an’ (‘ian’) do przyrostków ‘ol’, ‘tiol’, ‘peroksol’, etc. Aby uniknąć dwuznaczności, przed tymi przyrostkami używane są przedrostki zwielokrotniające ‘bis’, ‘tris’, etc..

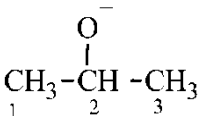
Zachowane nazwy hydroksyl dla OH^- i hydroperoksyl’ dla HOO^- są nazwami wstępnie wybranymi, ale nie mogą być podstawiane, tak więc nazwami dla CH_3O^- i $CH_3\text{-}OO^-$ są, odpowiednio, metoksylan lub metanolan lub metylooksydanid i metanoperoksolan lub metylodioksydanid.

Tradycyjne nazwy metoksyl, etoksyl, propoksyl (ale nie izopropoksyl), butoksyl, *tert*-butoksyl, fenoksyl i aminoksyl dla $CH_3\text{-}O^-$, $C_2H_5\text{-}O^-$, $C_3H_7\text{-}O^-$, $C_4H_9\text{-}O^-$, $(CH_3)_3C\text{-}O^-$, $C_6H_5\text{-}O^-$ i $H_2N\text{-}O^-$ są zachowane jako preferowane nazwy IUPAC.

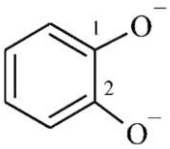
Przykład:



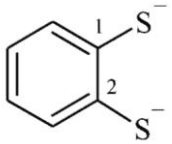
metoksyl (PIN)
metanolan



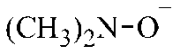
propan-2-olan (PIN)
izopropoksyl



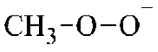
benzeno-1,2-bis(olan) (PIN)
(nie pirokatecholan)



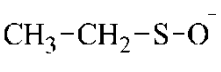
benzeno-1,2-bis(tiolan) (PIN)



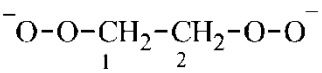
dimetyloaminoksylan
(PIN)(dimetyloamino)oksydanid



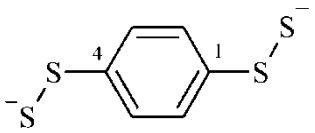
metanoperoksolan (PIN)
metylodioksydanid



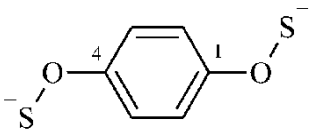
etano(*SO*-tioperoksolan) (PIN)
(etylosulfanylo)oksydanid
(nie benzenosulfenian; kwas sulfenowy nie jest już zalecany; patrz P-56.2)



etano-1,2-bis(peroksolan) (PIN)
etano-1,2-diylobis(dioksydanid)



benzeno-1,4-bis(ditioperoksolan) (PIN)
1,4-fenylenobis(disulfanid)



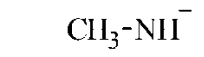
benzeno-1,4-bis(*OS*-tioperoksolan) (PIN)
1,4-fenylenobis(oksy)bis(sulfanid)

P-72.2.2.2.3 Aniony utworzone z amin i imin

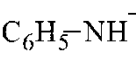
Aminy i iminy z ujemnym ładunkiem na każdym atomie azotu nazywa się z użyciem przyrostków ‘aminid’ i ‘iminid’ utworzonych przez dodanie przyrostka ‘id’ do przyrostka odpowiednio, ‘amina’ lub ‘imina’ z pominięciem końcowego ‘a’; przedrostek ‘bis’ używa się do wskazania dwóch przyrostków ‘aminid’. Tak utworzone nazwy są preferowanymi nazwami IUPAC. Kiedy dwa ujemne ładunki występują na jednym atomie azotu aminy, preferowaną nazwę IUPAC tworzy się używając przyrostka ‘aminodiid’. Zachowane nazwy ‘amid’ i ‘imid’ dla anionów, odpowiednio, H_2N^- i HN^{2-} mogą być stosowane jako macierzyste aniony w ogólnej nomenklaturze.

Używanie zespolonych przyrostków ‘aminian’, ‘iminian’ i aminodiian’ jest zmianą w stosunku do poprzedniego postępowania, w którym stosowano macierzyste aniony H_2N^- i HN^{2-} dla wskazania występowania amin i imin z ujemnymi ładunkami.

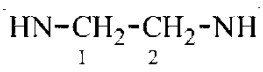
Przykłady:



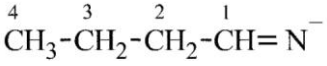
metanoaminid (PIN)
metyloamid



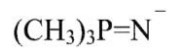
benzenoaminid (PIN)
fenyloamid



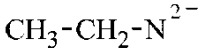
etano-1,2-bis(aminid) (PIN)
etano-1,2-diylobis(amid)

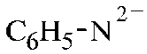


butanoiminid (PIN)



trimetylo-λ^5-fosfanoiminid (PIN)





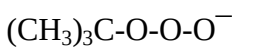
etanoaminodiid (PIN)
etyloazanodiid
etyloimid

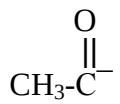
benzenoaminodiid (PIN)
fenyloazanodiid
fenyloimid

P-72.2.2.2.4 Centra anionowe na innych grupach charakterystycznych

Nazywanie centrów anionowych formalnie utworzonych przez usunięciu hydronów z atomów grup charakterystycznych innych niż rozważane w P-72.2.2.2.1, P-72.2.2.2.2 i P-72.2.2.2.3 opiera się na odpowiednich anionowych macierzystych wodorkach. Przyrostki takie jak ‘amidyd’ i ‘karboksyamidyd’ nie są zalecane.

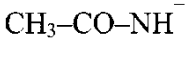
Przykłady:



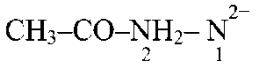


tert-butylotrioksydanid (PIN)
(2-metylopropano-2-ylo)trioksydanid
(1,1-dimetyloetylo)trioksydanid

1-oksoetan-1-id (PIN)



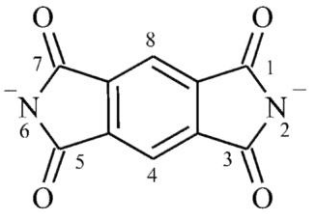
acetyloazanid (PIN)
acetyloamid



acetylohydrazyno-1,1-diid (PIN)
acetylodiazano-1,1-diid

hydroksyazanid (nazwa wstępnie wybrana)
hydroksyamid

hydroksyazanodiid (nazwa wstępnie wybrana)
hydroksyimid



1,3,5,7-tetraokso-5,7-dihydrobenzo[1,2-*c*:4,5-*c*′]dipirolo-2,6(1*H*,3*H*)-diid (PIN)

(nie 1,3,5,7-tetraokso-5,7-dihydropirolo[3,4-*f*]izoindolo-2,6-(1*H*,3*H*)-diid ; wielomacierzowy układ jest preferowany w porównaniu z dwuskładnikowym układem skondensowanym, patrz P-25.3.5.3).

P-72.3 ANIONY UTWORZONE PRZEZ ADDYCJĘ JONÓW HYDRYDOWYCH

Stosowane są dwie metody nazywania anionów formalnie utworzonych przez addycję hydrydu, H^-:

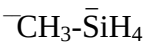
(1) przyrostek ‘uid’ opisuje anion formalnie utworzony przez addycję, do nazwanego macierzystego wodorku, hydrydu, H^-; wielokrotność wskazują przedrostki zwielokrotniające ‘di’, ‘tri’, etc.;

(2) przez dodanie przyrostka ‘id’ do macierzystego wodorku, którego wiązalność w miejscu anionu jest wyższa niż jego wiązalność standardowa i jest wyrażona λ-konwencją; w rezultacie następuje addycja hydrydu, H^- ,do macierzystego wodorku w jego standardowej wiązalności (patrz P-72.2.2.1).

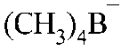
W poprzednich zaleceniach , do opisu addycji hydrydu był stosowany przedrostek zamiany szkieletu ‘borata’.

Preferowane nazwy IUPAC tworzy się za pomocą metody (1).

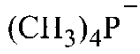
Przykłady:



metylosilanuid (PIN)

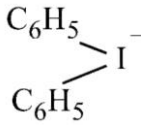


tetrametyloboranuid (PIN)



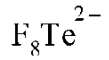
tetrametylofosfanuid (PIN)
tetrametylo-λ^5-fosfanid
tetrametylofosforanid

difluoro(fenylo)sulfanuid (PIN)
difluoro(fenylo)-λ^4-sulfanid

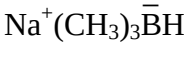


difenylojodanuid (PIN)
difenylo-λ^3-jodanid

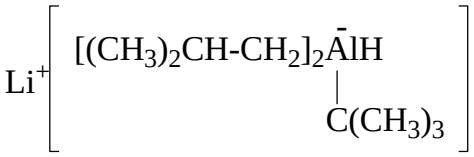
heksafluoro-λ^5-iodanuid (PIN)
heksafluoro- λ^7-jodanid



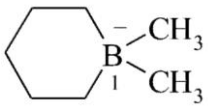
oktafluoro- λ^6-tellanodiuid (PIN)
(nazwa wstępnie wybrana)
oktafluoro- λ^{10}-tellanodiid



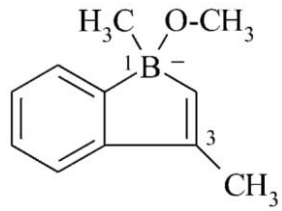
trimetyloboranuid sodu (PIN)



tert-butylobis(2-metylopropylo)alumanuid



1,1-dimetyloborinan-1-uid (PIN)
(nie 1,1-dimetylo-1-boratacykloheksan)



1-metoksy-1,3-dimetylo-1*H*-1-benzoborol-1-uid (PIN)
(nie 1-metoksy-1,3-dimetylo-1-boratainden)

P-72.4 NOMENKLATURA ZAMIENNA (‘a’) SZKIELETU

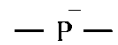
Centra anionowe w macierzystych wodorkach nazywa się dwoma metodami,stosując zasady nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu opisanej w podrozdziale P.15.4:

(1) tworząc nazwę obojętnego związku według nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu, a do opisania centrów anionowych używając przyrostki ‘ida’ i ‘uida’.
(2) dodając do nazwy odpowiedniego mononuklearnego wodorku anionowy przedrostek zamiany (‘a’) szkieletu utworzony w wyniku addycji przyrostka ‘id’ i ‘uid’; te przedrostki zamiany wskazują centra anionowe z wiązalnością, odpowiednio, o jednostkę niższą lub wyższą niż wiązalność odpowiedniego obojętnego mononuklearnego macierzystego wodorku.

W wyniku zastosowania metody (1) powstają preferowane nazwy IUPAC, innymi słowy, preferowane są nazwy, które nie wymagają użycia λ-konwencji do oznaczenia heteroatomów szkieletu o niestandardowej wiązalności.

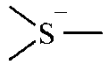
Przedrostki zamiany (‘a’) szkieletu z końcówkami ‘ata’, na przykład ‘borata’, nie są już brane pod uwagę.

Przykłady:

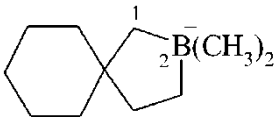


fosfanida (nazwa wstępnie wybrana)

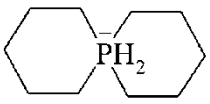
boranuida (nazwa wstępnie wybrana)
(nie borata)



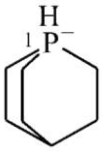
sulfanuida (nazwa wstępnie wybrana)



2,2-dimetyloboraspiro[4.5]dekan-2-uid (PIN)
2,2-dimetylo-2-boranuidaspiro[4.5]dekan
(nie 2,2-dimetylo-2-borataspiro[4.5]dekan)



6λ^5-fosfaspiro[5.5]undekan-6-uid (PIN)
6λ^5-fosfanuidaspiro[5.5]undekan
(nie 6-fosfataspiro[5.5]undekan)



1-fosfabicyklo[2.2.2]oktan-1-uid (PIN)
1-fosfanuidabicyklo[2.2.2]oktan
1λ^5-fosfabicyklo[2.2.2]oktan-1-id
1λ^5-fosfanidabicyklo[2.2.2]oktan

P-72.5 WIELOKROTNE CENTRA ANIONOWE

Wielokrotne centra anionowe, zgodnie z poprzednimi regułami, nazywa się kilkoma metodami.

P-72.5.1 Zespoły macierzystych anionów
P-72.5.2 Centra ‘id’ i ‘uid’ w tym samym macierzystym wodorku

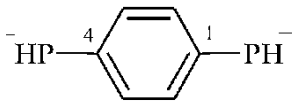
P-72.5.3 Anionowe grupy charakterystyczne na anionowych macierzystych wodorkach

P-72.5.1 Zespoły macierzystych anionów

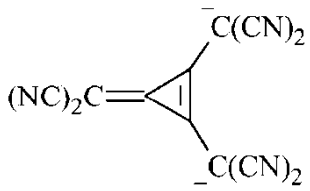
P-72.5.1.1 Zespoły pochodzące od macierzystych anionów

Związki anionowe z centrami anionowymi pochodzącymi od tego samego macierzystego wodorku, ale ulokowane w różnych częściach struktury, jeśli to możliwe, nazywa się według zasad nomenklatury multiplikacyjnej (patrz P-15.3) używając, tam gdzie to konieczne, przedrostki zwielokrotniające ‘bis’, ‘tris’, etc.

Przykłady:



1,4-fenylenobis(fosfanid) (PIN)



[3-(dicyjanometylideno)cykloprop-1-eno-1,2-diylo]bis(dicyjanometanid) (PIN)

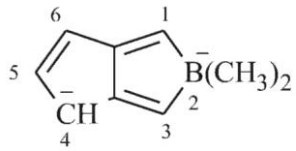
$HN^{-}\text{-}CO\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}CO\text{-}^{-}NH$

butanodioilobis(azanid) (PIN)
butanodioilobis(amid)

P-72.5.2 Centra ‘id’ i ‘uid’ w tym samym macierzystym wodorku

Związki anionowe z dwoma lub więcej centrami anionowymi w tej samej strukturze macierzystego wodorku, z których co najmniej jedno formalnie powstało przez usunięcie hydronu z pozycji w szkielecie i jedno przez dodanie hydrydu do innej pozycji, nazywa się dodając przyrostek ‘id’ a następnie przyrostek ‘uid’ do nazwy macierzystego wodorku. Każdy przyrostek, tam gdzie to konieczne, poprzedzany jest odpowiednim przedrostkiem zwielokrotniającym. Tam gdzie istnieje możliwość wyboru, niskie lokanty macierzystego wodorku przypisuje się najpierw centrom anionowym, niezależnie od ich rodzaju, a następnie centrom anionowym ‘uid’.

Przykład:

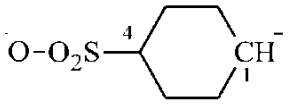


2,2-dimetylo-2,4-dihydrocyklopenta[*c*]borol-4-id-2-uid (PIN)

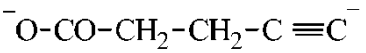
P-72.5.3 Anionowe grupy charakterystyczne w anionowych macierzystych wodorkach

Polianiony z centrami anionowymi ulokowanymi zarówno w części struktury będącej macierzystym wodorkiem jak i w grupie charakterystycznej i mogą być wyrażone jako anionowe przyrostki, nazywa się dodając anionowy przyrostek do nazwy macierzystego anionu utworzonej zgodnie z regułami zawartymi w P-72.2.2.1 i P-72.2.2.2. Tam gdzie istnieje możliwość wyboru, niskie lokanty przypisuje się anionowym atomom szkieletu.

Przykłady:



cykloheksan-1-ido-4-sulfonian (PIN)



pent-1-yn-1-id-5-ian (PIN)

P-72.6 CENTRA ANIONOWE WSPÓŁISTNIEJĄCE W ZWIĄZKACH MACIERZYSTYCH I W PODSTAWNIKACH

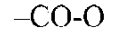
Kiedy centra anionowe nie są w tej samej macierzystej strukturze, jeden anion musi być wybrany jako macierzysty anion a pozostałe wyraża się jako anionowe podstawniki (podstawnik).

P-72.6.1 Przedrostki dla centrów anionowych utworzonych z kwasowych grup charakterystycznych.
P-72.6.2 Przedrostki dla anionowych chalkogenów
P-72.6.3 Systematycznie tworzone przedrostki zawierające anionowe centrum (centra)

P-72.6.1 Przedrostki dla centrów anionowych utworzonych z kwasowych grup charakterystycznych

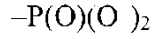
Anionowe podstawniki utworzone z kwasowych grup charakterystycznych w wyniku usunięcia hydronu ze wszystkich grup hydroksylowych, tiolowych, etc. lub chalkogenowego analogu dołączone do struktury macierzystej pojedynczym wiązaniem nazywa się za pomocą przedrostków utworzonych przez zamianę końcówki ’an’ (‘ian’) w nazwie anionowego przyrostka na ‘ano (iano)’.

Przykłady:



karboksylano (preferowany przedrostek)

sulfoniano (wstępnie wybrany przedrostek)



fosfoniano (wstępnie wybrany przedrostek)

arsoniano (wstępnie wybrany przedrostek)

P-72.6.2 Przedrostki dla anionowych chalkogenów

Te przedrostki tworzy się dodając do nazw oksyd, sulfid, selenid i telluryd końcówkę ‘o’.

Przykłady:

oksydo (wstępnie wybrany przedrostek)

sulfido (wstępnie wybrany przedrostek)

P-72.6.3 Systematycznie tworzone przedrostki zawierające anionowe centrum (centra)

Te przedrostki tworzy się dodając dołączalne przyrostki ‘yl’ (‘il’) lub ‘yliden’ do nazwy macierzystego anionu. Do wskazania wolnej walencyjności używa się zwielokrotniające przedrostki ’di’, ‘tri’, etc.. Gdy istnieje możliwość wyboru niskie lokanty przypisuje się wolnym walencyjnościom.

Przykłady:

metanidyl
(preferowany przedrostek)

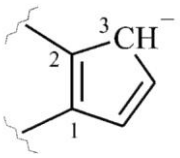
azanidyl
(wstępnie wybrany przedrostek)
amidyl

azanodiidyl
(wstępnie wybrany przedrostek)

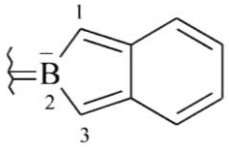
boranuidyl
(wstępnie wybrany przedrostek)

azanidyliden
(wstępnie wybrany przedrostek)

disulfanidyl
(wstępnie wybrany przedrostek)



cyklopenta-1,4-dien-3-ido-1,2-diyl
(preferowany przedrostek)



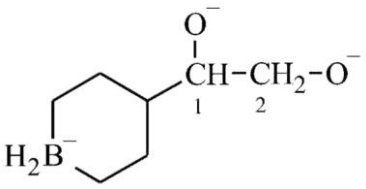
2*H*-2-benzoborol-2-uid-2-2-yliden
(preferowany przedrostek)

P-72.7 WYBÓR J MACIERZYSTEJ STRUKTURY ANIONOWEJ

Kiedy zachodzi potrzeba, anionową strukturę macierzystą wybiera się stosując kolejno następujące kryteria, aż do osiągnięcia rozstrzygającego wyboru:

(a) maksymalna liczba centrów anionowych każdego rodzaju, włączając anionowe przyrostki, w grupach charakterystycznych;

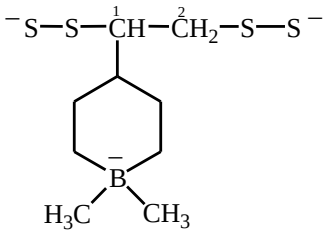
Przykład:



2-(borinan-1-uid-4-ylo)etano-1,2-bis(olan) (PIN)

(b) maksymalna liczba anionowych centrów ‘uid’ i ‘id’;

Przykład:



1-(1,1-dimetyloborinan-1-uid-4-ylo)etano-1,2-bis(ditioperoksolan) (PIN)
1-(1,1-dimetyloborinan-1-uid-4-ylo)etano-1,2-bis(disulfanid)

(c) maksymalna liczba centrów ‘uid’;

Przykład:

$^{-}P\text{-}\overset{2}{C}H_2\text{-}\overset{1}{C}H_2\text{-}\bar{A}sH_3$ (2- fosfanidyloetylo)arsanuid (PIN)

(d) maksymalna liczba starszych centrów anionowych, wymienianych w pierwszej kolejności w porządku starszeństwa klas: N > P > As > Pb > Al > Ga > In > Tl > O > S > Se > Te > C (patrz P-44.1.2);

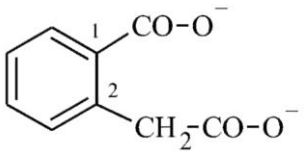
Porządek starszeństwa rodników odpowiada teraz porządkowi starszeństwa klas, a nie porządkowi przedrostków zamiany (‘a’) szkieletu jaki stosowano w RC-81.3.3.2, odn. 3.

Przykład:

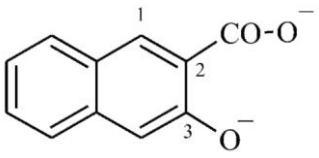
$^{-}SiH_2\text{-}\overset{2}{C}H_2\text{-}\overset{1}{C}H_2\text{-}\bar{P}H$ (2-silanidyloetylo)fosfanid (PIN)

(e) Jeśli nadal konieczny jest wybór dokonywany jest przez danie pierwszeństwa odpowiednim przyrostkom (patrz Tabela 4.4) i użycie ogólnego porządku starszeństwa klas (patrz P-41) i macierzystych struktur (patz P-41).

Przykłady:



2-(karboksylanometylo)benzoesan (PIN)
(pierścień jest starszy od łańcucha)

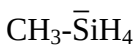


3-oksydonaftaleno-2-karboksylan (PIN)

P-72.8 PRZYROSTKI ‘ID’ I ‘UID’ ORAZ λ-KONWENCJA

P-72.8.1 W macierzystym wodorku nazwanym z użyciem λ-konwencji przyrostek ‘uid’ jest preferowany wzgledem przyrostka ‘id’

Przykłady:



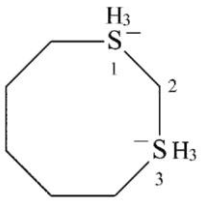
metylosilanuid (PIN)
metylo-λ^6-silanid

heksafluoro- λ^5-jodanuid
(nazwa wstępnie wybrana)
heksafluoro- λ^7-jodanid

P-72.8.2 Preferuje się przyrostek ‘id’ względem przyrostka ‘uid’ związanego z λ-konwencją; przyrostek ‘id’ jest także preferowany wobec ‘uid’ kiedy λ-konwencja związana jest z oboma anionowymi centrami.

Przykłady:

metanid (PIN)
λ^2-metanuid



$1\lambda^6,3\,\lambda^6$-ditiokano-1,2-diid (PIN)
$1\,\lambda^4,3\,\lambda^4$-ditiokano-1,3-diuid
$1\,\lambda^4,3\,\lambda^6$-ditiokan-3-id-1-uid

P-73 KATIONY

P-73.0 WPROWADZENIE

Do celów nomenklatury organicznej kation jest molekularnym indywiduum niosącym co najmniej jedną jednostkę ładunku dodatniego, formalnie utworzonym z macierzystego wodorku lub macierzystego związku przez dodanie jednego lub więcej hydronów, przez usunięcie jednego lub więcej hydrydów albo kombinację tych operacji. Atom uważany za miejsce ulokowania ładunku nazywany jest centrum kationowym. Kationy z dwoma lub więcej kationowymi centrami w tej samej strukturze nazywa się dikationami, trikationami, etc.

P-73.1 Kationowe związki z kationowymi centrami formalnie utworzonymi przez addycję hydronów.
P-73.2 Kationy utworzone przez usunięcie jonów hydrydowych
P-73.3 Kationowe związki z kationowymi centrami o niestandardowych stanach walencyjnych
P-73.4 Nomenklatura zamienna (‘a’) szkieletu dla kationów
P-75.5 Kationowe związki z wielokrotnymi kationowymi centrami
P-73.6 Nazwy przedrostków kationów
P-73.7 Wybór macierzystej struktury
P-73.8 Przyrostki ‘ium’ i ‘ylium’ oraz λ-konwencja

P-73.1 ZWIĄZKI KATIONOWE Z CENTRAMI KATIONOWYMI FORMALNIE UTWORZONYMI PRZEZ ADDYCJĘ HYDRONÓW

P-73.1.1 Kationowe centra w macierzystych wodorkach
P-73.1.2 Kationowe centra w grupach charakterystycznych

P-73.1.1 Kationowe centra w macierzystych wodorkach

P-73.1.1.1 Zachowane nazwy dla monokationowych mononuklearnych macierzystych kationów pierwiastków grup 15, 16 i 17, używane tylko w ogólnej nomenklaturze.

Macierzysty jon formalnie utworzony przez addycję jednego hydronu do mononuklearnego macierzystego wodorku rodzin: azotu, chalkogenów i halogenów w standardowym stanie wiązalności nazywa się dodając określenia ‘onium’ do rdzenia pierwiastka jak pokazano w Tabeli 7.3. Te kationy są związkami macierzystymi; mogą być podstawiane, ale do użycia tylko w ogólnej nomenklaturze. Preferowane nazwy IUPAC omawiane są w P-73.1.1.2.

Tabela 7.3 Zachowane wstępnie wybrane nazwy mononuklearnych macierzystych kationów pierwiastków z grup 15, 16 i 17

H_4N^+ amonium	H_3O^+ oksonium	H_2F^+ fluoronium
H_4P^+ fosfonium	H_3S^+ sulfonium	H_2Cl^+ chloronium
H_4As^+ arsonium	H_3Se^+ selenonium	H_2Br^+ bromonium
H_4Sb^+ stibonium	H_2Te^+ telluronium	H_2I^+ jodonium

H_2Bi^+ bizmutonium

Przykłady:

$(CH_3)_4N^+$

tetrametyloamonium
tetrametyloazanium
N,*N*,*N*-trimetylometanoaminium (PIN)

$Cl(CH_3)_3P^+$

chloro(trimetylo)fosfonium
chloro(trimetylo)fosfanium (PIN)

$(CH_3)_2\overset{+}{S}H$

dimetylosulfonium
dimetylosulfanium (PIN)

$CH_3\text{-}C{\equiv}O^+$

etylidynooksonium
etylidynooksydanium (PIN)

$(C_6H_5)_2I^+$

difenylojodonium
difenylojodanium (PIN)

$CH_3\text{-}\overset{+}{F}\text{-}Cl$

chloro(metylo)fluoronium
chloro(metylo)fluoranium (PIN)

P-73.1.1.2 Ogólne reguły systematycznego nazywania kationów w macierzystych wodorkach

Kation formalnie utworzony w wyniku addycji jednego lub więcej hydronów do dowolnej pozycji obojętnego macierzystego wodorku (wymienionego w rozdziale P-2), albo którego stopień uwodornienia został zmodyfikowany (patrz P-3.1), nazywa się dodając do nazwy macierzystego wodorku przyrostek ‘ium’ poprzedzany przez przedrostki zwielokrotniające ‘di’, ‘tri’, etc. wskazujące wielokrotność identycznych centrów kationowych. Te nazwy monuklearnych kationów pochodzących od mononuklearnych macierzystych wodorków pierwiastków z grup 15, 16 i 17 są preferowanymi nazwami IUPAC, w przeciwieństwie do nazw podanych w Tabeli 7.3. Kiedy lokalizacja hydronu nie jest określona, strukturę zamyka się w nawiasie kwadratowym.

Przykłady:

$^+CH_5$

metanium (PIN)

$[C_6H_7]^+$

benzenium (PIN)

H_4N^+

azanium
(nazwa wstępnie wybrana)
amonium

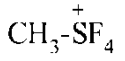
H_4P^+

fosfanium
(nazwa wstępnie wybrana)
fosfonium

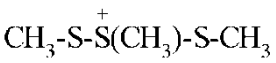
H_3S^+

H_2Cl^+

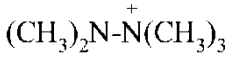
sulfanium
(nazwa wstępnie wybrana)
sulfonium



tetrafluoro(metylo)-λ^4-sulfanium (PIN)
tetrafluoro(metylo)-λ^4-sulfonium

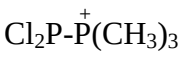


chloranium
(nazwa wstępnie wybrana)
chloronium

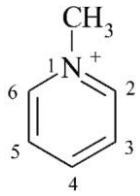


pentametylohydrazynium (PIN)
pentametylodiazanium

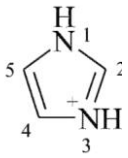
1,2,3-trimetylotrisulfan-2-ium (PIN)



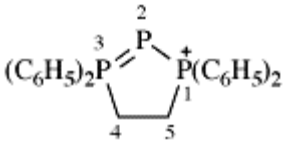
2,2-dichloro-1,1,1-trimetylodifosfan-1-ium (PIN)



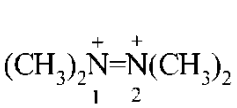
1-metylopirydyn-1-ium (PIN)



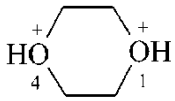
1*H*-imidazol-3-ium (PIN)



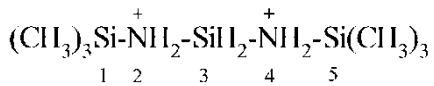
1,1,3,3-tetrafenylo-4,5-dihydro-1*H*-1,2,3λ^5-trifosfol-1-ium (PIN)



tetrametylodiazeno-1,2-diium (PIN)



1,4-dioksano-1,4-diium (PIN)



N,*N*′-bis(trimetylosililo)silanobis(aminium) (PIN)
1,1,1,5,5,5-heksametylotrisilazano-2,4-diium

P-73.1.2 Kationowe centra w grupach charakterystycznych

Zasada stosowana przy nazywaniu kationowych centrów w grupach charakterystycznych polega na użyciu możliwie największej obojętnej macierzy. Jest ona stosowana zwłaszcza w

przypadku obojętnych związków opisanych przez przyrostki zawierające atom(y) azotu (patrz Tabela 7.4, poniżej). Inne klasy nazywa się w oparciu o największy kationowy wodorek macierzysty.

P-73.1.2.1 Kationowe związki pochodzące od obojętnych związków opisanych przyrostkami nazywa się na dwa sposoby.

(1) Kationowe przyrostki pochodzące od nazw: kwasów nazwanych z użyciem przyrostka, amidów, nitryli, amin i imin tworzy się przez dodanie przyrostka ‘ium’ do podstawowego przyrostka jak pokazano w Tabeli 7.4. Te kationowe przyrostki są używane ze zwielokrotniającymi przedrostkami ‘bis’, -tris’, etc. do wskazania wielokrotności. Zachowane nazwy, użyte w preferowanych nazwach IUPAC i w ogólnej nomenklaturze (z wyjątkiem ‘mocznika’, patrz P-73.1.2.2) są modyfikowane przez dodania przyrostka ‘ium’ do nazwy obojętnego indywiduum.

Tabela 7.4 Przyrostki dla kationowych grup charakterystycznych[1]

Przyrostek obojętnej grupy charakterystycznej	**Przyrostek kationowej grupy charakterystycznej**
amid, karboksyamid	amidium, karboksyamidium
imid, karboksyimid	imidium, karboksyimidium
nitryl, karbonitryl	nitrylium, karbonitrylium
amina	aminium
imina	iminium

[1]Kiedy zachowane nazwy używane w ogólnej nomenklaturze wskazują na obecność dwóch grup charakterystycznych, na przykład sukcynonitryl, odpowiedni kationowy przyrostek oznacza addycję jednego hydronu do każdej charakterystycznej grupy.

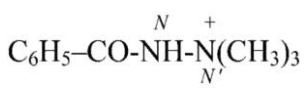
(2) Kiedy nie występują atomy azotu, przez podstawianie kationowych macierzystych wodorków opisanych w P-73.1.2.

Metodę (1) i (2) stosuje się do tworzenia preferowanych nazw IUPAC tak jak to ilustrują poniższe przykłady.

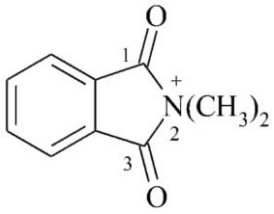
Przykłady:

N,*N*,*N*-trimetylometanoaminium (PIN)
tetrametyloamonium

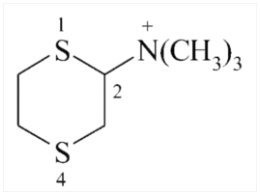
N,*N*,*N*-trimetylobenzoaminium (PIN)
benzoilotrimetyloamonium



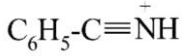
N′,*N*′,*N*′-trimetylobenzohydrazyd- *N*′-ium (PIN)
2-benzoilo-1,1,1-trimetylohydrazynium
2-benzoilo-1,1,1-trimetylodiazan-1-ium



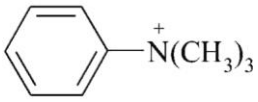
2,2-dimetylo-1,3-diokso-2,3-dihydro-1*H*-izoindol-2-ium
N,*N*-dimetyloftalimidium



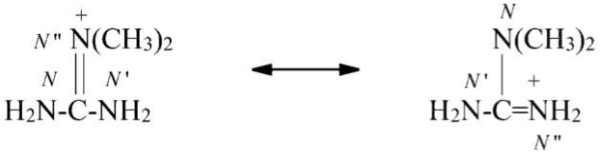
N,*N*.*N*-trimetylo-1,4-ditiano-2-aminium (PIN)
(1,4-ditian-2-ylo)trimetyloamonium



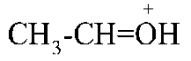
benzonitrylium (PIN)
benzylidynoamonium
benzylidynoazanium



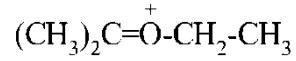
N,*N*,*N*-trimetyloanilinium (PIN)
N,*N*,*N*-trimetylobenzenoaminium
trimetylo(fenylo)amonium



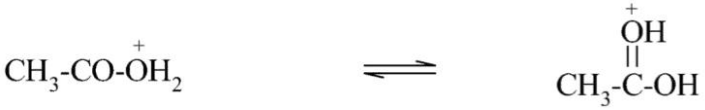
N,*N*-dimetyloguanidynium (PIN)
(lokanty '*N*,*N'* są niższe od lokantów '*N'*,*N"* przy określaniu tych form rezonansowych)



etylidenooksydanium (PIN)
etylidenooksonium



etylo(propan-2-ylideno)oksydanium (PIN)
etylo(propan-2-ylideno)oksonium

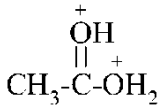


acidium octowe

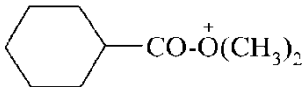
acetylooksydanium PIN)

(1-hydroksyetylideno)oksydanium (PIN)

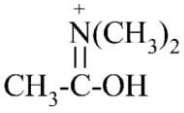
Uwaga: Określenie 'acidium' obejmuje obie tautomeryczne struktury; indywidualne tautomery nazywa się systematycznie biorąc za podstawę 'jon oksydanium'.



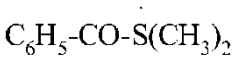
(1-oksydaniumyloetylideno)oksydanium (PIN)
acidodiium octowe



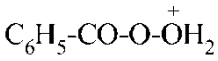
(cykloheksanokarbonylo)(dimetylo)oksydanium (PIN)
(cykloheksanokarbonylo)(dimetylo)oksonium
(nie acidium *O*,*O*-dimetylocykloheksanokarboksylowe)



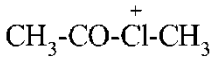
(1-hydroksyetylideno)(dimetylo)azanium (PIN)
(1-hydroksyetylideno)(dimetylo)amonium
(nie acidium *N*,*N*-dimetyloetanoimidowe)



benzoilo(dimetylo)sulfanium (PIN)
benzoilo(dimetylo)sulfonium
(nie acidium *S*,*S*- dimetylobenzenokarbotiowe)



2-benzoilo-1-dioksydanium (PIN)
(nie *O*,*O*-acidium peroksybenzoesowe)



acetylo(metylo)chloranium (PIN)

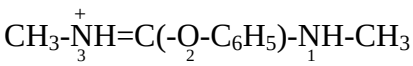
P-73.1.2.2 Jony uroniowe i chalkogenowe analogi

Kationy formalnie utworzone przez dodanie hydronu do mocznika (lub izomocznika) nazywa się biorąc za podstawę macierzysty kation ‘uronium’, oznaczający poniższe tautomeryczne struktury:

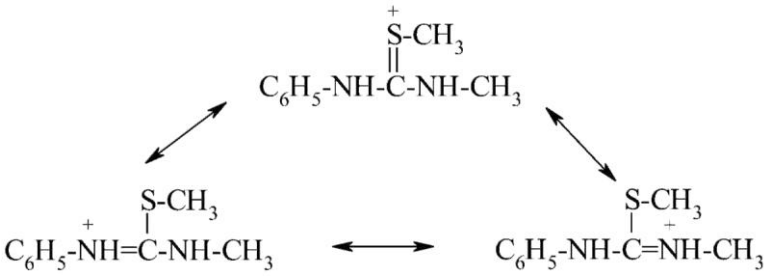
W preferowanych nazwach IUPAC dla macierzystego kationu uronium nie używa się już liczbowych lokantów

Lokanty są takie jak stosowane w przypadku mocznika i izomocznika. Chalkogenowe analogi nazywa się biorąc za podstawę macierzyste kationy takie jak ‘tiouronium’, etc. Według tej metodologii tworzone są preferowane nazwy IUPAC.

Przykłady:



N,*N*′-dimetylo-*O*-fenylouronium (PIN)
1,3-dimetylo-2-fenylouronium
N-[(metyloamino)fenoksymetylideno]metanoaminium



N,*S*-dimetylo-*N*′-fenylotiouronium (PIN)

P-73.2 ZWIĄZKI KATIONOWE Z KATIONOWYMI CENTRAMI FORMALNIE UTWORZONYMI PRZEZ ODERWANIE JONÓW HYDRYDOWYCH

P.73.2.1 Nazwy klasowo-funkcyjne
P-73.2.2 Kationowe centra w wodorkach macierzystych
P-73.2.3 Kationowe centra w grupach charakterystycznych

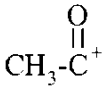
P-73.2.1 Nazwy klasowo-funkcyjne

Kationowe związki, które można uznać za formalnie powstające w wyniku oderwania elektronów z odpowiedniego rodnika można nazywać używając nazwy klasy ‘kation’, jako odrębnego słowa, przed nazwą rodnika. Polikationy wskazuje się przez dodanie do nazwy klasy odpowiednich zwielokrotniających przedrostków ‘di’, ‘tri’, etc.. Nazwy systematyczne utworzone z użyciem przyrostka ‘ium’ są preferowanymi nazwami IUPAC (patrz P-73.2.2). Kiedy ładunek nie jest zlokalizowany, strukturę ujmuje się w kwadratowy nawias.

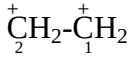
Przykłady:

kation metylu
metylium (PIN)

kation fenylu
benzenylium (fenylium) (PIN)



kation acetylu
acetylium (PIN)



dikation etano-1,2-diylu
etano-1,2-bis(ylium) (PIN)

P-73.2.2 Kationowe centra w macierzystych wodorkach

Poniższe zalecenia ściśle naśladują zalecenia (patrz P-71) dla nazywania rodników.

P-73.2.2.1 Kationowe centra w macierzystych wodorkach
P-73.2.2.2 Dodany wskazany atom wodoru
P-73.2.2.2 Jony diazoniowe

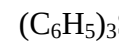
P-73.2.2.1 Kationowe centra w macierzystych wodorkach

P-73.2.2.1.1 Specjalna metoda

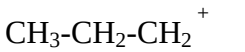
Kationy formalnie utworzone przez usunięcie hydrydu, H^-, z końcowego atomu nasyconego nierozgałęzionego acyklicznego węglowodoru, nasyconego monocyklicznego węglowodoru lub mononuklearnego wodorku macierzystego pierwiastka należącego do grupy 14, to znaczy, metanu, CH_4, silanu, SiH_4, germananu, GeH_4, stannanu, SnH_4 i plumbanu, PbH_4, nazywa się zamieniając końcówki ‘an’ w nazwie macierzystego wodorku na przyrostek ‘ylium’.

Przykłady:

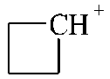
metylium (PIN)



trifenylosililium



propylium (PIN)



cyklobutylium (PIN)

P-73.2.2.1.2 Ogólna metoda

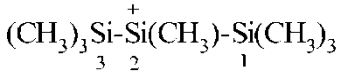
Według ogólnej metody kationy formalnie utworzone przez usunięcie jednego hydrydu, H^-, z dowolnej pozycji macierzystego wodorku nazywa się dodając do nazwy macierzystego wodorku przyrostek ‘ylium’ (‘ilium’). Di- i polikationy formalnie utworzone przez usunięcie dwóch lub więcej hydrydów z macierzystego wodorku nazywa się z użyciem przyrostka ‘ylium’ (ilium’) i przedrostków zwielokrotniających ‘bis’, ‘tris’, etc. Dla macierzystych wodorków używa się preferowane nazwy IUPAC jak wskazano w Rozdziałach P-4 i P-5. W następujących poniżej przykładach wskazane są preferowane nazwy IUPAC, a nazwy tradycyjne przeznaczone są do ogólnej nomenklatury.

Przykłady:

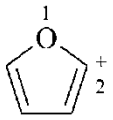
azanylium (nazwa wstępnie wybrana)
aminylium
nitrenium

fenylosulfanylium (PIN)

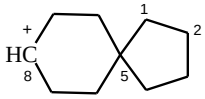
3-metylotriaz-1-en-1-ylium (PIN)



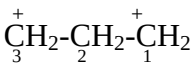
heptametylotrisilan-2-ylium (PIN)



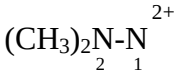
furan-2-ylium (PIN)



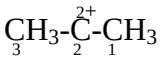
spiro[4.5]dekan-8-ylium (PIN)



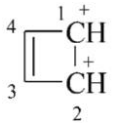
propano-1,3-bis(ylium) (PIN)



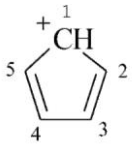
2,2-dimetylohydrazyno-1,1-bis(ylium) (PIN)



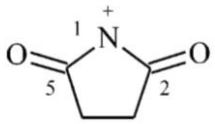
propano-2,2-bis(ylium) (PIN)



cyklobut-3-eno-1,2-bis(ylium) (PIN)



cyklopenta-2,4-dien-1-ylium (PIN)
cyklopentadienylium (patrz P-76.1)

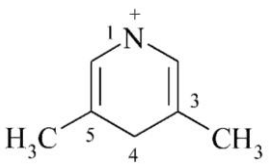


2,5-dioksopirolidyn-1-ylium (PIN)
sukcynoimidylium

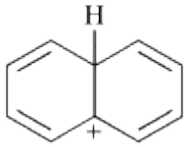
P-73.2.2.2 ‘Dodany wskazany atom wodoru’

Kationowe centrum w macierzystym wodorku mancude w pozycji gdzie nie ma dostatecznej liczby atomów wodoru aby bezpośrednio zastosować zalecenia do użycia ‘ylium’, jak podano w P-73.2.2.1.2, jest formalnie utworzone z pochodnej dihydro cyklicznego macierzystego wodorku. Taki kation może także być opisany przez zastosowanie zasady ‘dodany wskazany atom wodoru’ (patrz P-14.7). W tej metodzie pochodną ‘hydro’ opisuje się przez wskazanie atomu wodoru z pary dihydro, który pozostaje po utworzeniu kationowego centrum za pomocą pisanej kursywą dużej litery *H* i lokantu atomu szkieletu, do którego przyłączony jest atom wodoru. Oba symbole ujmuje się w nawias i umieszcza w nazwie odpowiedniego macierzystego wodorku bezpośrednio za lokantem kationowego centrum. Nazwy utworzone metodą ‘dodany wskazany atom wodoru’ są preferowanymi nazwami IUPAC (patrz P-58.2).

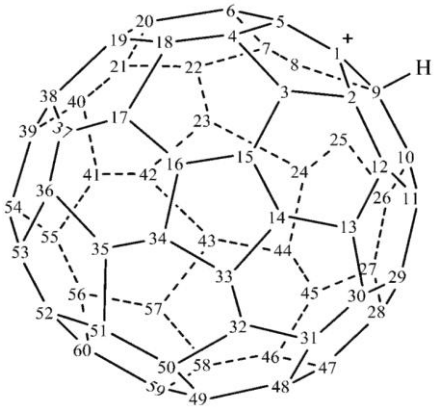
Przykłady:



3,5-dimetylopirydyn-1(4*H*)-ylium (PIN)
3,5-dihydro-1,4-dihydropirydyn-1-ylium



naftalen-4a(8a*H*)-ylium (PIN)
4a,8a-dihydronaftalen-4a-ylium

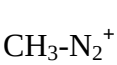


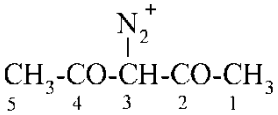
(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren-1(9*H*)-ylium (PIN)
1,9-dihydro(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren-1-ylium

P-73.2.2.3 Jony diazoniowe

Kationy zawierające grupę $–N_2^+$ przyłączoną do macierzystego wodorku tradycyjnie nazywa się zgodnie z zasadami nomenklatury podstawnikowej, używając przyrostka ‘diazonium’ i przedrostków zwielokrotniających ‘bis’. ‘tris’, etc. do wskazania wielokrotności. Jony diazoniowe można także nazywać biorąc za podstawę macierzysty kation ‘diazenylium’, $HN=N^+$. Preferowane nazwy IUPAC powstają w wyniku użycia przyrostka ‘diazonium’.

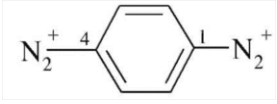
Przykłady:





metanodiazonium (PIN)
metylodiazenylium

2,4-dioksopentano-3-diazonium (PIN)
(2,4-dioksopentan-3-ylo)diazenylium



benzeno-1,4-bis(diazonium) (PIN)
1,4-fenylenobis(diazenylium)

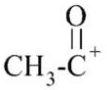
P-73.2.3 Kationowe centra w grupach charakterystycznych

P-73.2.3.1 Jony acyliowe

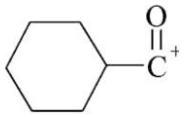
Kationy formalnie utworzone przez usunięcie wszystkich hydroksyli w postaci jonów hydroksylowych, z kwasów mających nazwy systematyczne lub zachowane, nazywa się zamieniając ‘kwas …owy’ na przyrostek ‘oylium’ lub ‘ylium’, albo ‘kwas ….karboksylowy’ na ‘karbonylium’,

zgodnie z regułami nazywania obojętnych grup acylowych (patrz P-65.1.7). Te nazwy są preferowanymi nazwami IUPAC.

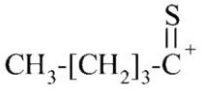
Przykłady:



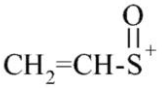
acetylium (PIN)
kation acetylu



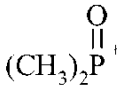
cykloheksanokarbonylium (PIN)
kation cykloheksanokarbonylu



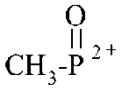
pentanotioylium (PIN)



etanosulfinylium



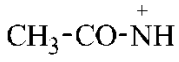
dimetylofosfinylium (PIN)



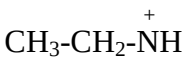
metylofosfonylium (PIN)

P-73.2.3.2 Kationy powstające przez usunięcie hydrydu z atomu azotu charakterystycznej grupy amidu, aminy i iminy nazywa się stosując odpowiednie przyrostki dla grup obojętnych modyfikowane dodaniem przyrostka 'ylium'. Wielokrotność tych przyrostków jest określana za pomocą przedrostków zwielokrotniających 'bis', 'tris', etc. Kationy pochodzące od imidów nazywa się biorąc za podstawę odpowiedni heterocykl (patrz P-73.2.2.1.2). Te nazwy są preferowanymi nazwami IUPAC; są one preferowane wobec nazw utworzonych przez podstawienie odpowiedniego macierzystego kationu.

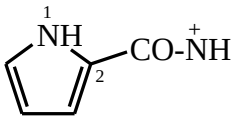
Przykład:



acetamidylium (PIN)



etanoaminylium (PIN)



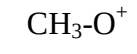
1*H*-pirolo-2-karboksyamidylium (PIN)

P-73.2.3.3 Kation formalnie utworzony przez usunięcie atomu wodoru w postaci hydrydu z grupy hydroksylowej (lub chalkogenowego analogu) kwasu albo charakterystycznej grupy hydroksylowej nazywa się następująco:

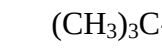
(1) addytywnie , używając określenia 'oksylium' lub 'peroksylium'
(2) przez podstawienie macierzystego kationu 'oksydanylium' lub 'dioksydanylium (wstępnie wybrane nazwy) przez odpowiedni podstawnik.

Nazwy metoksylium, etoksylium, propoksylium, butoksylium, fenoksylium i aminoksylium są zachowane jako preferowane nazwy IUPAC. Poza tym, metoda (1) prowadzi do preferowanych nazw IUPAC.

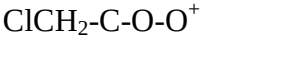
Przykłady:



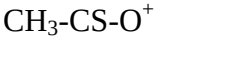
metoksylium (PIN)
metylooksydanylium



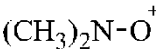
tert-butyloperoksylium (PIN)
tert-butylodioksydanylium



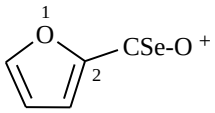
(chloroacetylo)oksylium (PIN)
chloroacetoksylium
(chloroacetylo)oksydanylium



(etanotionylo)oksylium (PIN)
(etanotioilo)oksydanylium



dimetyloaminooksylium (PIN)
(dimetyloamino)oksydanylium

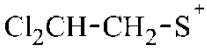


(furano-2-karboselenoilo)oksylium (PIN)
(furano-2-karboselenoilo)oksydanylium

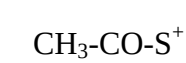
P-73.2.3.4 Kationowe centra w innych grupach charakterystycznych

Wszystkie inne kationowe centra nazywa się jako podstawiane odpowiednie macierzyste kationy. W przypadku siarkowych centrów kationowych określenie ‘tioksylium’ i ‘ditioperoksylium’, ale nie ‘tioperoksylium’ (termin niejednoznaczny) mogą być użyte w ogólnej nomenklaturze. Stosowanie określeń ‘tiylium’ lub ‘pertiylium’ jest niezalecane.

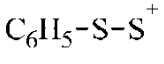
Przykłady:



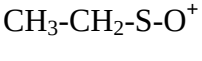
(2,2-dichloroetylo)sulfanylium (PIN)
(2,2-dichloroetylo)tioksylium
[nie 2,2-dichloro(etylotiylium)]



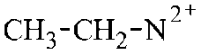
actylosulfanylium (PIN)
acetylotioksylium
(nie acetylotiylium



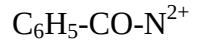
fenylodisulfanylium (PIN)
fenyloditioperoksylium
(nie fenylopertiylium)



(etylosulfanylo)oksylium (PIN
(etylosulfanylo)oksydanylium
[nie (etylosulfanylo)tioperoksylium]

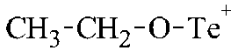


etyloazanobis(ylium) (PIN)
[nie etanoaminobis(ylium)]



benzoiloazanobis(ylium) (PIN)
[nie benzamidobis(ylium)]

2-benzoilohydrazyn-1-ylium (PIN)
2-benzoilodiazan-1-ylium
(nie benzohydrazyd-*N*′-ium)



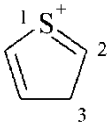
etoksytellanylium (PIN)
(nie etylotelluroperoksylium)

P-73.3 λ-KONWENCJA Z PRZYROSTKIEM ‘YLIUM’

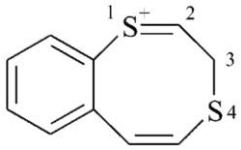
P-73.3.1 Zastosowanie λ-konwencji z przyrostkiem ‘ylium’

Kationowy heterocykl mający kationowe centrum na heteroatomie, który ma jedno szkieletowe wiązanie więcej niż odpowiadający mu obojętny hetero cykl, nazywa się przez dodanie przyrostka ‘ylium’ do nazwy obojętnego macierzystego wodorku, dla którego użyto λ-konwencję aby opisać niestandardowy stan wiązalności heteroatomu i ten atom ma co najmniej jeden atom wodoru w obojętnym heterocyklu, na którym przyrostek ‘ylium’ może być użyty. Wskazany atom wodoru (patrz P-14.7 i P-58.2.1) jest używany w miarę potrzeby.

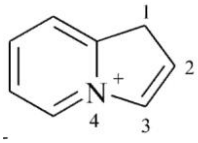
Przykłady:



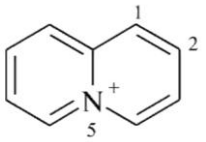
3*H*-1λ^4-tiofen-1-ylium (PIN)



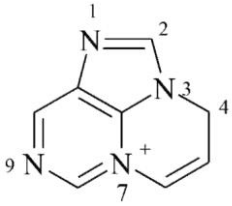
3*H*-1λ^4,4-benzoditiocyn-1-ylium (PIN)



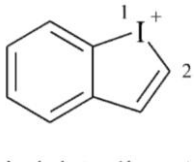
1*H*-4λ^5-indolizyn-4-ylium (PIN)



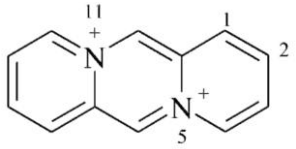
5λ^5-chinolizyn-5-ylium (PIN)



4*H*-7λ^5-pirymido[1,2,3-*cd*]puryn-7-ylium (PIN)



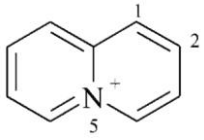
1λ^3-benzojodol-1-ilium (PIN)



$5\lambda^5$,$11\lambda^5$-dipirydo[1,2-*a*:1′,2′-*d*]pirazyno-5,11-bis(ylium) (PIN)

W przypadku niektórych kationowych heterocykli tego typu, zwłaszcza z kationowymi centrami na heteroatomach pierwiastków z drugiego okresu, może wydawać się bardziej dogodne użycie nomenklatury zamiennej (patrz P-73.4) albo wyprowadzenie nazwy przez usunięcie dwóch atomów wodoru z kationu utworzonego przez addycję hydronu, używając przedrostka ‘didehydro’; na przykład ‘4a-azonianaftalen’ albo ‘2,5-didehydro-2*H*-chinolizyn-5-ium’ dla kationu o tradycyjnej nazwie chinolizynium.

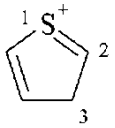
Przykład:



$5\lambda^5$-chinolizyn-5-ylium (PIN)
4a-azonianaftalen (‘azonia’ patrz P-73.4)
2,5-didehydro-2*H*-chinolizyn-5-ium

Bywa jednak że metoda ‘dehydro’ staje się całkiem niewygodna, wymagając użycia w pewnych przypadkach obu przedrostków: ‘hydro’ i ‘dehydro’.

Przykład:

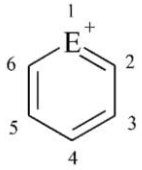


3*H*-$1\lambda^4$-tiofen-1-ylium (PIN)
1,2-didehydro-2,3-dihydrotiofen-1-ium
(nie 3-tienylium)

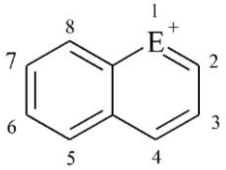
P-73.3.2 Nazwy zachowane

Skrócone i tradycyjne nazwy zebrane w Tabeli 7.5 są zachowane jako preferowane nazwy IUPAC i do stosowania w ogólnej nomenklaturze.

Tabela 7.5 Zachowane nazwy ‘ylium’ kationowych związków macierzystych



E = O pirylium (PIN)

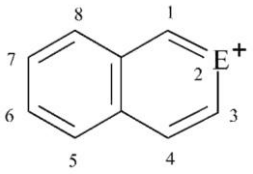


E = O $1\lambda^4$-benzopiran-1-ylium (PIN)
chromenylium

E = S tiopirylium (PIN)

E = Se selenopirylium (PIN)

E = Te telluropirylium (PIN)



E = S $1\lambda^4$-benzotiopiran-1-ylium (PIN)
tiochromenylium

E = Se $1\lambda^4$-benzoselenopiran-1-ylium (PIN)
selenochromenylium

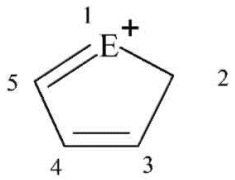
E = Te $1\lambda^4$-benzotelluropiran-1-ylium (PIN)
tellurochromenylium

E = O $2\lambda^4$-benzopiran-2-ylium (PIN)
izochromenylium

E = S $2\lambda^4$-benzotiopiran-2-ylium (PIN)
izotiochromenylium

E = Se $2\lambda^4$-benzoselenopiran-2-ylium (PIN)
izoselenochromenylium

E = Te $2\lambda^4$-benzotelluropiran-2-ylium (PIN)
izotellurochromenylium

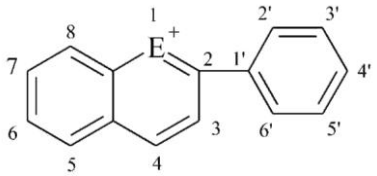


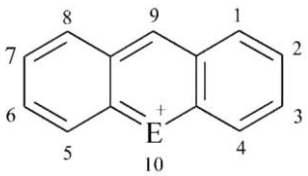
E = O 2*H*-$1\lambda^4$-furan-1-ylium (PIN)
2*H*-furylium

E = S 2*H*-$1\lambda^4$-tiofen-1-ylium (PIN)
2*H*-tienylium

E = Se 2*H*-$1\lambda^4$-selenofen-1-ylium (PIN)
2*H* –selenofenylium

E = Te 2*H*-$1\lambda^4$-tellurofen-1-ylium (PIN)
2*H*-tellurofenylium





E = O flawylium

E = S tioflawylium

E = Se selenoflawylium

E = Te telluroflawylium

E = O ksantylium

E = S tioksantylium

E = Se selenoksantylium

E = Te telluroksantylium

P-73.4 NOMENKLATURA ZAMIENNA (‘a’) SZKIELETU DLA KATIONÓW

Używane są dwie metody do nazywania kationowych centrów za pomocą nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu:

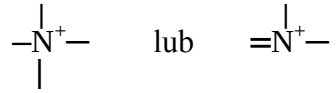
(1) nazywa się związek stosując obojętne przedrostki zamiany (‘a’) szkieletu, a następnie wskazuje się centra kationowe za pomocą odpowiednich przyrostków ‘ium’ i ‘ylium’;
(2) stosując kationowe przedrostki zamiany (‘a’) szkieletu.

Kationowe przedrostki zamiany (‘a’) szkieletu do wskazania kationowych centrów mających wiązalność o jeden rząd wyższą niż wiązalność odpowiedniego obojętnego mononuklearnego wodorku, za wyjątkiem bizmutu, tworzy się zamieniając końcówki ‘a’ w zwykłych przedrostkach zamiany (‘a’) szkieletu na ‘onia’; kationowy przedrostek zamiany (‘a’) szkieletu odpowiadający ‘bizmutonium’ jest ‘bizmutonia’.

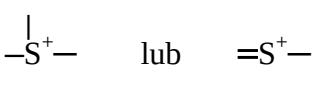
Kationowe przedrostki zamiany (‘a’) szkieletu do wskazania kationowych centrów, mające wiązalność o jeden rząd niższą niż wiązalność odpowiedniego obojętnego mononuklearnego wodorku za wyjątkiem węgla, tworzy się dodając przyrostek ‘ylia’ do nazwy podstawowego macierzystego wodorku.

Kationowe przedrostki zamiany (‘a’) szkieletu stosowane są w taki sam sposób jak obojętne przedrostki zamiany.

Przykłady:



azonia (nazwa wstępnie wybrana)



tionia (nazwa wstępnie wybrana)

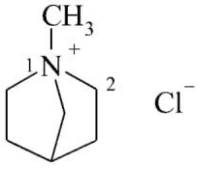
jodonia (nazwa wstępnie wybrana)

azanylia (nazwa wstępnie wybrana)

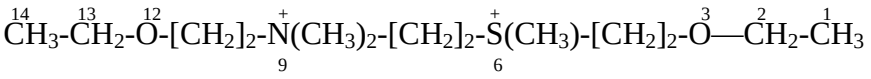
boranylia (nazwa wstępnie wybrana)

Metoda (1) prowadzi do preferowanych nazw IUPAC. Co więcej, preferowane są nazwy nie wymagające wskazywania atomu szkieletu o niestandardowej wiązalności z użyciem λ-konwencji (patrz P-73.1 i P-73.2).

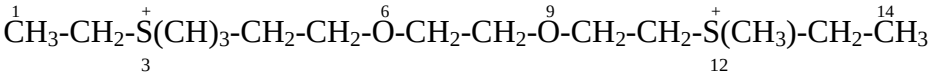
Przykłady:



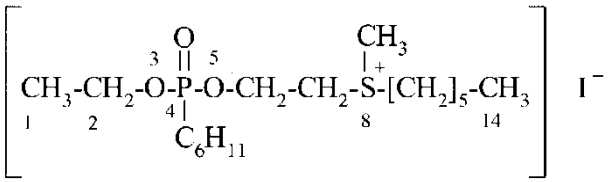
chlorek 1-metylo-1-azabicyklo[2.2.1]heptan-1-ium (PIN)
chlorek 1-metylo-1-azoniabicyklo[2.2.1]heptanu



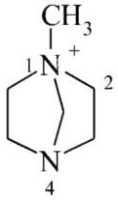
2-etoksy-*N* -{2-[(2-etoksyetylo)metylosulfaniumylo]etylo}-*N*,*N*-dimetyloetanoaminium (PIN)
{nie 6,9,9-trimetylo-3,12-dioksa-6-tia-9-azatetradekano-6,9-diium; ani nie 6,9,9-trimetylo-3,12-dioksa-6-tionia-9-azoniatetradekan; nazwa musi opierać się na kationie pochodzącym z preferowanej nazwy aminy, którą jest 2-etoksy-*N*-{2-[(2- etoksyetylo)metylosulfanylo] etylo}-*N*-metyloetanoamina a nie *N*-(2-etoksyetylo)-2-[(2- etoksyetylo)metylosulfanylo]- *N*-metyloetanoamina, która jest preferowana alfanumerycznie ale nie spełnia warunków nazwy zamiennej (‘a’) szkieletu ponieważ nie ma czterech heteroatomów}



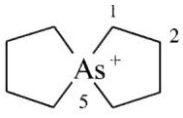
3,12-dimetylo-6,9-dioksa-3,12-ditiatetradekano-3,12-diium (PIN)
3,12-dimetylo-6,9-dioksa3,12-ditioniatetradekan



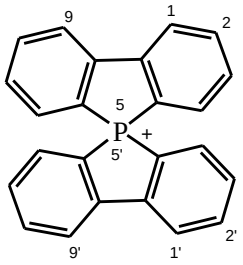
jodek 4-cykloheksylo-8-metylo-4-okso-3,5-dioksa-8-tia-4λ^5-fosfatetradekan-8-ium (PIN)
jodek 4-cykloheksylo-8-metylo-4-okso-3,5-dioksa-8-tionia-4λ^5-fosfatetradekanu
jodek (2-{[cykloheksylo(etoksy)fosfinoilo]oksy}etylo)heksylo(metylo)sulfonium



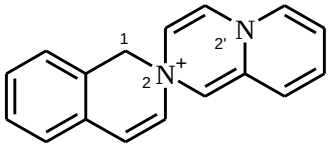
1-metylo-1,4-diazabicyklo[2.2.1]heptan-1-ium (PIN)



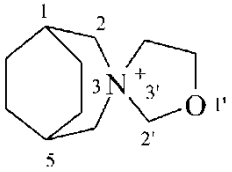
5λ^5-arsaspiro[4.4]nonan-5-ylium (PIN)
5-arsoniaspirospiro[4.4]nonan



5*H*-5λ^5,5′-spirobi[benzo[*h*]fosfinoindol]-5-ylium (PIN)
9-fosfonia-9,9′-spirobi[fluoren]; tworzenie nazwy odpowiedniego obojętnego, niekationowego związku patrz P-24.8.4.



1*H*-2λ^5-spiro[izochinolino-2,2′-pirydo[1,2-*a*]pirazyn]-2-ylium (PIN)



2′*H*-3λ^5-spiro[3-azabicyklo[3.2.2]nonano-3,3′-[1,3]oksazol]-3-ylium (PIN)

P-73.5 ZWIĄZKI KATIONOWE Z WIELOKROTNYMI CENTRAMI KATIONOWYMI

Kationowe związki z wielokrotnymi kationowymi centrami, jako uzupełnienie poprzednich reguł, nazywa się kilkoma metodami.

P-73.5.1 Zespoły macierzystych kationów
P-73.5.2 Centra ‘ium’ i ‘ylium’ w tym samym macierzystym wodorku
P-73.5.3 Kationowe charakterystyczne grupy w macierzystych kationach

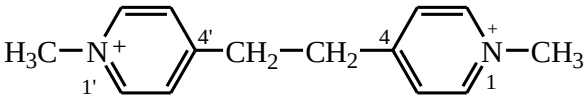
P-73.5.1 Zespoły macierzystych kationów

P-73.5.1.1 Zespoły pochodzące z macierzystych kationów

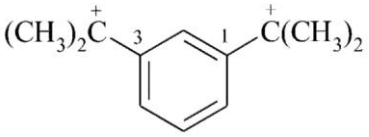
Kationowe związki z kationowymi centrami pochodzącymi z tego samego macierzystego wodorku, ale ulokowane w różnych częściach struktury, nazywa się, jeśli to możliwe, według zasad nomenklatury multiplikacyjnej (patrz P-15.3) stosując przedrostki zwielokrotniające ‘bis’. ‘tris’, etc.

Przykłady:

1,4-fenylenobis(fosfanium) (PIN)
1,4-fenylenobis(fosfonium)



4,4′-(etano-1,2-diylo)bis(1-metylopirydyn-1-ium) (PIN)

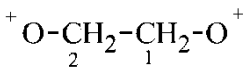


2,2′-(1,3-fenyleno)di(propan-2-ylium) (PIN)
2,2′-benzeno-1,3-diylodi(propan-2-ylium)

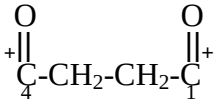
| P-73.5.1.2 Polikationy z kationowymi centrami w grupach charakterystycznych

Polikationy z kationowymi centrami w grupach charakterystycznych nazywa się stosując nomenklaturę podstawnikową albo nomenklaturę multiplikacyjną i stosując przedrostki zwielokrotniające ‘bis’, ‘tris’, etc.

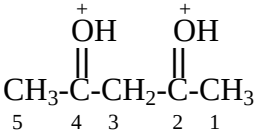
Przykłady:



etano-1,2-diylobis(oksylium) (PIN)
etano-1,2-diylobis(oksydanylium)

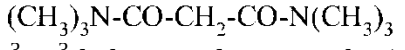


1,4-dioksobutano-1,4-bis(ylium) (PIN)

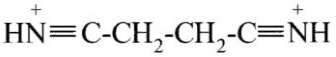


pentano-2,4-diylidenobis(oksydanium) (PIN)
pentano-2,4-diylidenobis(oksonium)

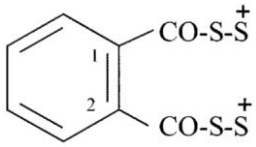
benzeno-1,4-bis(karboksyamidylium) (PIN)
(1,4-fenylenodikarbonylo)bis(azanylium)



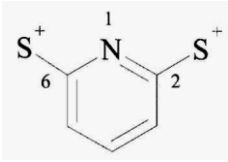
N[1], *N*[1], *N*[1],*N*[3], *N*[3], *N*[3]-heksametylopropanobis(amidium) (PIN)
N,*N*,*N*,*N*′,*N*′,*N*′-heksametylomalonoamidium



butanobis(nitrylium) (PIN)
butanodiylidynobis(amonium)
butanodiylidynobis(azanium)



(benzeno-1,2-dikarbonylo)bis(disulfanylium) (PIN)
(1,2-fenylenodikarbonylo)bis(disulfanylium)

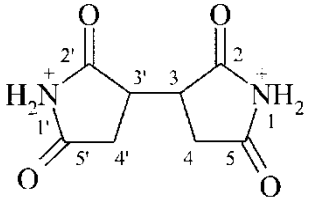


pirydyno-2,6-diylobis(sulafanylium) (PIN)
pirydyno-2,6-diylobis(tioksylium)

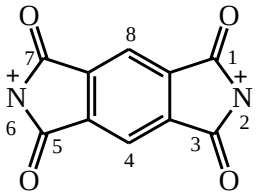
benzeno-1,4-bis(sulfonylium)
1,4-fenylenobis(diokso-λ^6-sulfanylium) (PIN)

P-73.5.1.3 Polikationy pochodzące z cyklicznych diimidów i poliimidów nazywa się biorąc za podstawę heterocykliczną strukturą imidów.

Przykłady:



2,2′,5,5′-tetraokso[3,3′-bipirolidyno]-1,1′-diium (PIN)



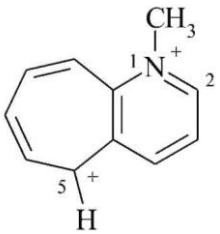
1,3,5,7-tetraoksobenzeno[1,2-*c*:4,5-*c*′]dipirolo-2,6(1*H*,3*H*)-bis(ylium) (PIN)

P-73.5.2 Centra ‘ium’ i ‘ylium’ w tym samym macierzystym wodorku

Cykliczne związki z dwoma lub więcej centrami kationowymi w tej samej strukturze macierzystego wodorku, z których przynajmniej jedno jest wskazywane przyrostkiem ‘ium’ a inne przyrostkiem ‘ylium’ nazywa się umieszczając, w tej kolejności, przyrostki ‘ium’ i ‘ylium’ za nazwą macierzystego wodorku, poprzedzone tam gdzie to potrzebne, przez odpowiednie przedrostki zwielokrotniające i lokanty.

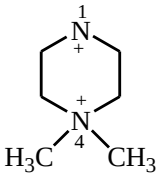
Kiedy występuje możliwość wyboru, niskie lokanty przypisuje się najpierw kationowym centrom niezależnie od typu (‘ium’ lub ‘ylium’) a następnie centrom ‘ylium’.

Przykłady:



1-metylo-5*H*-cyklohepta[*b*]pirydyn-1-ium-5-ylium (PIN)

[nie 1-metylo-5*H*-1-azoniabenzo[7]annulen-5-ylium; tam gdzie możliwe są nazwy skondensowane nie zaleca się stosowania nazw zamiennych (‘a’) szkieletu

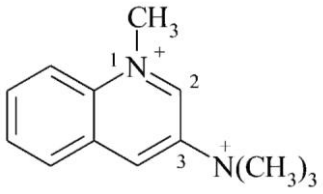


4,4-dimetylopiperazyn-4-ium-1-ylium (PIN)

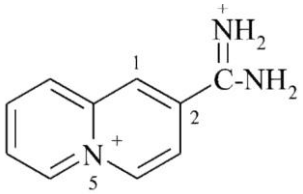
P-73.5.3 Kationowe charakterystyczne grupy w macierzystych kationach

P-73.5.3.1 Kationowe związki z kationowymi centrami zarówno w części struktury będącej macierzystym wodorkiem jak i w charakterystycznej grupie wyrażonej kationowym przyrostkiem nazywa się wymieniając oba centra. Kationowe centrum w macierzystym wodorku jest wymieniane jako pierwsze, a po nim kationowy przyrostek.

Przykłady:



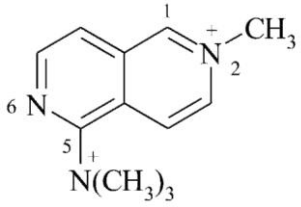
N,*N*,*N*,1-tetrametylochinolin-1-ium-3-aminium (PIN)



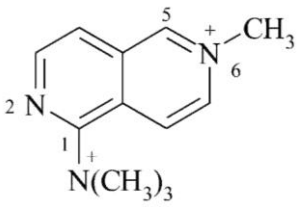
5λ^5-chinolizyn-5-ylium-2-karboksyimidoamidium (PIN)

P-73.5.3.2 Kiedy występuje możliwość wyboru, niskie lokanty ustala się dla kationowych centrów szkieletu przed rozważeniem lokantów dla kationowych przyrostków. Jest to spójne z wyborem najniższych lokantów dla odpowiednich obojętnych związków (patrz P-14.4).

Przykład:



nie



N,*N*,*N*,2-tetrametylo-2,6-naftyrydyn-2-ium-5-aminium (PIN)
(nie *N*,*N*,*N*,6-tetrametylo-2,6-naftyrydyn-6-ium-1-aminium)

P-73.6 NAZWY PRZEDROSTKÓW KATIONOWYCH

Polikationy, w których nie wszystkie centra kationowe mogą być włączone do kationowego wodorku macierzystego albo kationowego związku macierzystego nazywa się wybierając jedną część struktury jako macierzysty kation i wymieniając inne części (część) jako podstawniki kationowe. Wybór macierzystego kationu osiąga się stosując kryteria wyboru kationowej struktury macierzystej. W jonach obojnaczych (zwitterjonach) i kationorodnikach kationowa część jest zawsze podstawiona do części anionowej lub do części zawierającą rodnik. Jest to zgodne ze starszeństwem anionów i rodników przed kationami.

Stosuje się dwie metody nazywania jednostki strukturalnej podstawnika zawierającego kationowe centra:

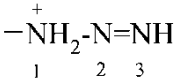
(1) wszystkie nazwy przedrostków tworzy się dodając przyrostki ‘yl’, ‘yliden’, etc. do nazwy kationu, poprzedzone, tam gdzie to potrzebne do wskazania krotności, przedrostkami zwielokrotniającymi ‘di’, ‘tri’, etc. i odpowiednimi lokantami. Tam gdzie istnieje możliwość wyboru numeracji, wolne walencyjności otrzymują możliwie najniższe lokanty, przyrostek ‘yl’ jest starszy niż ‘yliden’.

(2) przedrostki wyrażające monowalencyjny podstawnik powstający z mononuklearnego macierzystego kationu wskazanego przez ‘ium’ lub przez ‘ylium’ opisanego w Tabeli 7.3 tworzy się zamieniając końcówkę ‘onium’ macierzystego kationu na ‘io’ lub ‘onio’.

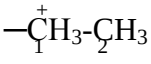
Metoda (1) prowadzi do preferowanych nazw IUPAC.

Przykłady:

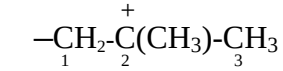
azaniumyl (wstępnie wybrany przedrostek)
amoniumyl
amonio



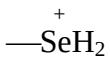
triaz-2-en-1-ium-1-yl
(wstępnie wybrany przedrostek)
triaz-2-en-1-io



etan-1-ium-1-yl
(preferowany przedrostek)



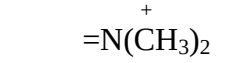
2-metylopropan-2-ylium-1-yl
(preferowany przedrostek)



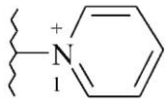
selenoniumyl
(wstępnie wybrany przedrostek)
selenonio

metylosulfaniumdiyl (preferowany przedrostek)
metylosulfoniumdiyl

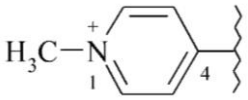
diazyn-1-ium-1-yl (wstępnie wybrany przedrostek



dimetyloazaniumyliden
(preferowany przedrostek)
(nie dimetyloamoniumyliden),
(nie dimetyloimonio)



pirydyn-1-ium-1-yl (preferowany przedrostek)
pirydynio



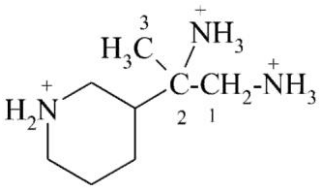
1-metylopirydyn-1-ium-4-yl (preferowany przedrostek)

P-73.7 WYBÓR MACIERZYSTEJ STRUKTURY

P-73.7.1 Macierzystą kationową strukturę wybiera się stosując kolejno następujące kryteria, aż do osiągnięcia rozstrzygającego wyboru:

(a) maksymalna liczba kationowych centrów każdego rodzaju, włączając grupy kationowych przyrostków, w tym pochodzących z grup charakterystycznych.

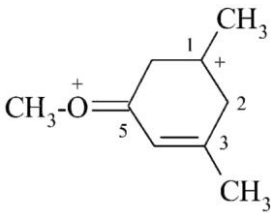
Przykład:



2-(piperydyn-1-ium-3-ylo)propano-1,2-bis(aminium) (PIN)

(b) maksymalna liczba kationowych centrów ‘ylium’ z wyjątkiem nazw opartych na λ-konwencji (patrz P-73.8.2).

Przykład:

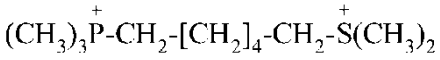


1,3-dimetylo-5-(metylooksydaniumylideno)cykloheks-3-en-1-ylium (PIN)

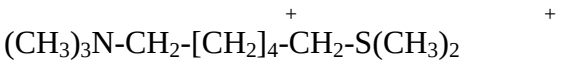
(c) maksymalna liczba starszych centrów kationowych, przy czym jako pierwsze wymieniane w porządku starszeństwa klas: N > P > As > Pb > Al > Ga > In > Tl > O > S > Se > Te > C (patrz P-41).

Porządek starszeństwa rodników jest teraz taki jak porządek starszeństwa klas, a nie jak porządek przedrostków zamiennych (‘a’) szkieletu stosowany w RC-81.3.3.2, odn. 3.

Przykłady:



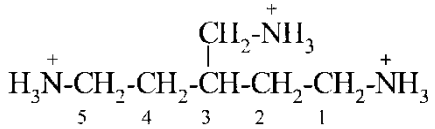
[6-(dimetylosufaniumylo)heksylo] trimetylofosfanium (PIN)



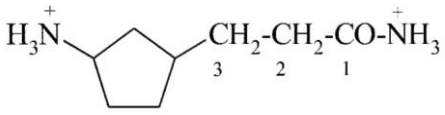
6-(dimetylosulfaniumylo)-*N*,*N*,*N*- trimetyloheksano-1-aminium (PIN)

(d) Jeśli wybór jest nadal potrzebny, dokonuje się go stosując ogólne kryteria, zgodnie z zasadami, regułami i konwencjami opisanymi w rozdziałach od P-1 do P-6.

Przykłady:



3-(azaniumylometylo)pentano-1,5-bis(aminium) (PIN)



3-(3-azaniumulocyklopentylo)propanoamidium (PIN)

P-73.8 PRZYROSTKI ‘IUM’ *VS* ‘YLIUM’ I λ-KONWENCJA

P-73.8.1 Przyrostek ‘ylium’ jest preferowany względem przyrostka ‘ium’ dodanego do macierzystego wodorku zmodyfikowanego λ-konwencją .

Przykład

	azanylium (nazwa wstępnie wybrana)
H_2N^+	λ^1-azanium
	aminylium
	nitrenium

P-73.8.2 Przyrostek ‘ium’ jest preferowany wobec przyrostka ‘ylium’ dodanego do macierzystego wodorku zmodyfikowanego λ-konwencją; przyrostek ‘ium’ jest także preferowany nad ‘ylium’ kiedy λ-konwencja musi być użyta do określenia obu centrów.

Przykład:

fosfanium (wstępnie wybrana nazwa)	$1\lambda^4,3\lambda^4$-ditiokano-1,3-diium (PIN)
fosfonium	$1\lambda^6,3\lambda^6$-ditiokano-1,3-bis(ylium)
λ^5-fosfanylium	$1\lambda^6,3\lambda^4$-ditiokano-3-ium-1-ylium

P-74 ZWITTERJONY

P-74.0 WPROWADZENIE

Związki zwitterjonowe mają zarówno dodatnie jak i ujemne centra jonowe. W większości przykładów związki te są obojętne, ponieważ zawierają równą liczbę formalnych jednostek ładunku o przeciwnym znaku. Najlepiej ilustrują to jonowe formy aminokwasów. W tym podrozdziale wszystkie struktury są przedstawione jako jony obojnacze, chociaż niektóre mogą być narysowane jako obojętne lub jonowe struktury.

Ten podrozdział obejmuje również wewnętrzne sole i związki dipolarne. P-74.1 zajmuje się związkami zwitterjonowymi z centrami jonowymi w tym samym macierzystym związku i z centrami jonowymi w różnych strukturach macierzystych. W P-74.2 mamy do czynienia z 1,2- i 1,3-dipolarnymi związkami.

Zgodnie ze starszeństwem klas, w zwitterjonach centrum anionowe ma pierwszeństwo przed kationowym. Tak więc w zwitterjonowych związkach centra anionowe są preferowane w doborze niższych lokantów i stają się strukturami macierzystymi, do których jest podstawiane kationowe centrum. CAS daje centrom kationowym pierwszeństwo przed centrami anionowymi.

P-74.1 ZWITTERJONOWE STRUKTURY MACIERZYSTE Z ANIONOWYMI I KATIONOWYMI CENTRAMI W TYM SAMYM ZWIĄZKU MACIERZYSTYM WŁĄCZAJĄC CENTRA JONOWE W GRUPACH CHARAKTERYSTYCZNYCH WSKAZYWANYCH PRZYROSTKAMI

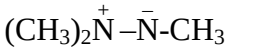
P-74.1.1 Centra jonowe w tej samej strukturze macierzystej

Związki zwitterjonowe z jonowymi centrami w tej samej strukturze macierzystej można nazywać łącząc odpowiednie dołączalne przyrostki na końcu nazwy macierzystego wodorku w

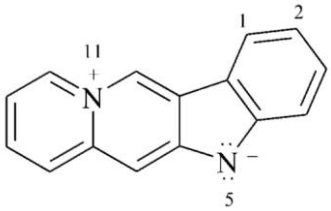
kolejności ‘ium’, ‘ylium’, ‘ide’, ‘uide’. Ta metoda jest preferowana wobec metody używającej jonowe przedrostki zamienne, jak wskazano w P-72.4 i P-73.4. W każdym przypadku przyrostki anionowe wymienia się w nazwie po kationowych i mają one starszeństwo w przypisywaniu niskich lokantów. Przedrostki zwielokrotniające ‘di’, ‘tri’, etc. lub ‘bis’, ‘tris’, etc., odpowiednio dla każdego typu przyrostka, dodaje się celem określenia liczby każdego rodzaju centrum jonowego. Kiedy istnieje możliwość wyboru, najniższe lokanty przypisuje się centrom jonowym w następującej kolejności, według malejącgo porządku starszeństwa: ‘uid’ (‘uida’), ‘id’ (‘ida’), ‘ylium’ (‘ylia’) i ‘ium’ (‘onia’).

Do celów nomenklatury, związki zwiterjonowe mające jonowe centra w tej samej macierzystej strukturze, nie są traktowane jako związki obojętne. Jest to zmiana w metodologii opisanej w RC-84.1.1 (odn. 3) i ilustruje ją ostatni przykład poniżej.

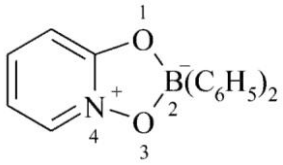
Przykłady:



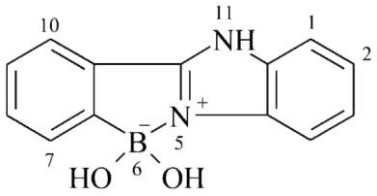
1,2,2-trimetylohydrazyn-2-ium-1-id (PIN)



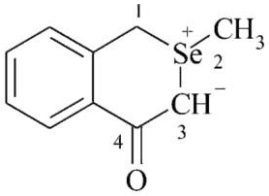
5*H*-11λ^5-5*H*-indolo[2,3-*b*]chinolizyn-11-ylium-5-id (PIN)



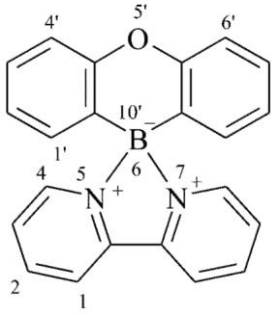
2,2-difenylo-4λ^5-[1,3,4,2]dioksaazaborylo[4,4-*a*]pirydyn-4-ylium-2-uid (PIN)



6,6-dihydroksy-6,11-dihydro-5λ^5-benzoimidazolo[1,2-*b*]benzoazaborol-5-ylium-6-uid (PIN)



2-metylo-4-okso-3,4-dihydro-1*H*-2-benzoselenopiran-2-ium-3-id (PIN)
(nie 2-metylo-3,4-dihydro-1*H*-2-benzoselenopiran-2-ium-3-id-4-on)
2-metylo-4-okso-3,4-dihydro-1*H*-izoselenochromen-2-ium-3-id (PIN)
(nie 2-metylo-3,4-dihydro-1*H*- izoselenochromen-2-ium-3-id-4-on)



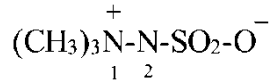
$5\lambda^5,7\lambda^5$-spiro[1,3,2-diazaborolo[3,4-*a*:5,1-*a*′]dipirydyno-6,10′-fenoksaborynin]-5,7-bis(ylium)-6-uid (PIN)

Uwaga: Nazwa tej struktury narysowanej jako wewnątrzcząsteczkowy addukt: patrz P-68.1.6.1.1

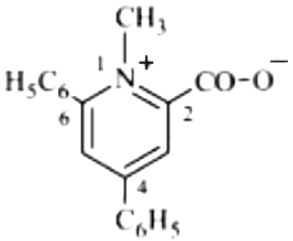
P-74.1.2 Związki zwitterjonowe z co najmniej jednym centrum jonowym w grupie charakterystycznej

Zwitterjonowe związki z co najmniej jednym jonowym centrum w grupie charakterystycznej można nazywać dodając właściwy jonowy przyrostek do nazwy jonowego macierzystego wodorku. W nazwach, przyrostki kationowe są wymieniane przed anionowymi. Przy wyznaczeniu niższych lokantów preferowane są centra jonowe na atomach szkieletu macierzystego wodorku względem lokantów pozycji przyłączenia grup charakterystycznych określonych jonowymi przyrostkami.

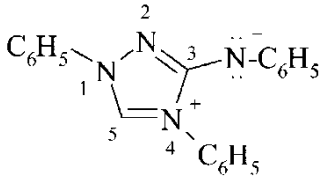
Przykłady:



1,1,1-trimetylohydrazyn-1-ium-2-sulfonian (PIN)



1-metylo-4,6-difenylopirydyn-1-ium-2-karboksylan (PIN)

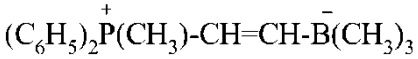


N,1,4-trifenylo-1*H*-1,2,4-triazol-4-ium-3-aminid (PIN)
N-(1,4-difenylo-1*H*-1,2,4-triazol-4-ium-3-ylo)benzenoaminid

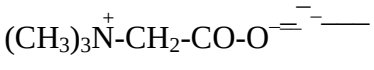
P-74.1.3 Centra anionowe i kationowe w różnych strukturach macierzystych

Związki zwiterjonowe z centrami anionowymi i kationowymi w różnych strukturach macierzystych można nazywać dodając przedrostek do nazwy centrum kationowego albo części struktury zawierających centra kationowe, dołączone do nazwy anionowej struktury macierzystej.

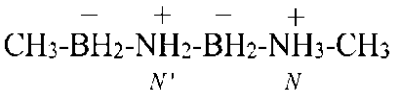
Przykłady:



trimetylo{2-[metylo(difenylo)fosfoniumylo]etenylo}boranuid (PIN)
trimetylo{2-[metylo(difenylo)fosfaniumylo]etenylo}boranuid



(trimetyloazaniumylo)octan (PIN)
(trimetyloamoniumylo)octan



metylo{[(metyloazaniumylo)boranuidylo]azaniumylo}boranuid (PIN)
2,4-diaza-3,5-diboraheksano-2,4-diium-3,5-diuid
3,5-diazonia-2,4-diboranuidaheksan
[nie 1-metylo-3-(metyloazaniumylo)diborazan-2-ium-1,3-diuid; nazw takich jak diborazan nie uważa się już za macierzyste wodorki, patrz P-21.2.3.1).

P-74.2 ZWIĄZKI DIPOLARNE

Związki dipolarne są elektrycznie obojętnymi cząsteczkami zawierającymi ujemny i dodatni ładunek w conajmniej jednej z ich głównych kanonicznych struktur rezonansowych. W większości związków dipolarnych ładunki są zdelokalizowane; jednakże określenie jest również stosowane do rodzajów, w których nie ma to miejsca. Związki 1,2-dipolarne mają przeciwne ładunki na sąsiednich atomach. Określenie związki 1,3-dipolarne odnosi się do takich, w których znacząca kanoniczna forma rezonansowa może być przedstawiona przez rozdzielenie ładunku na trzy atomy.

P-74.2.1 1,2-Dipolarne związki
P-74.2.2 1,3-Dipolarne związki
P-74.2.3 Dipolarne podstawniki

P-74.2.1 1,2-Dipolarne związki

P-74.2.1.1 ‘Ylidy’

Związki, w których anionowe miejsce ‘Y^{-}’ (pierwotnie tylko na atomie węgla ale obecnie włączono inne atomy) jest połączone bezpośrednio z heteroatomem ‘X^{+}’ (zwykle atomy: azotu, fosforu, siarki, selenu i telluru) mającym formalnie dodatni ładunek są 1,2-dipolarnymi rodzajami typu R_mX^+- Y^{-}-R_n. Jeżeli ‘X’ jest nasyconym atomem pierwiastka z pierwszego szeregu układu okresowego, ‘ylid’ jest zwykle przedstawiany jako forma z rozdzielonymi ładunkami; jeżeli ‘X^{+}’ jest pierwiastkiem z drugiego, trzeciego, etc. szeregu ylid przedstawia się jako nienaładowane kanoniczne formy, $R_mX{=}YR_n$.

Te ‘ylidy’ są podzielone na podklasy: ylidy azotowe, ylidy fosforowe, ylidy tlenowe, ylidy siarkowe, etc. Mogą być nazywane na różne sposoby w zależności od charakteru atomów ‘X’ i ‘Y’:

(1) jako związki zwiterjonowe;
(2) kiedy X = P, As, Sb, Bi, S, Se i Te, przez zastosowanie λ-konwencji;

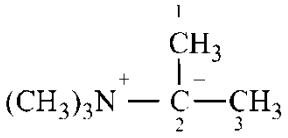
(3) nomenklaturą klasowo-funkcyjną używając nazwy klas: oksyd (tlenek), sulfid, imid.

Metoda (1) stosuje się do wszystkich ylidów i prowadzi do preferowanych nazw IUPAC

P-74.2.1.1.1 Azotowe ylidy

Ogólną strukturą ylidów azotowych jest R_3N^+-C^-R_2.

Przykład:

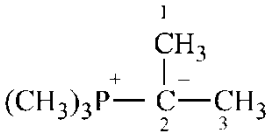


(1) 2-(trimetyloazaniumylo)propan-2-id (PIN)
2-(trimetyloamoniumylo)propan-2-id

P-74.2.1.1.2 Ylidy fosforowe

Ogólną strukturą fosforowych ylidów jest R_3P^+- C^-R_2.

Przykład:

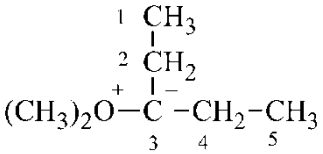


(1) 2-(trimetylofosfaniumylo)propan-2-id (PIN)
2-(trimetylofosfoniumylo)propan-2-id
(2) trimetylo(propan-2-ylideno)-λ^5-fosfan
izopropylidenotrimetylofosforan

P-74.2.1.1.3 Tlenowe ylidy

Ogólną strukturą tlenowych ylidów jest R_2O^+-C^-R_2.

Przykład:

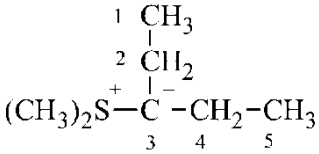


(1) 3-(dimetylooksydaniumylo)pentan-3-id (PIN)
3-(dimetylooksoniumylo)pentan-3-id

P-74.2.1.1.4 Siarkowe ylidy

Ogólną strukturą siarkowych i selenowych ylidów jest R_2S^+-$C^-R_2 \leftrightarrow R_2S{=}CR_2$.

Przykład:



(1) 3-(dimetylosulfaniumylo)pentan-3-id (PIN)
3-(dimetylosulfoniumylo)pentan-3-id
(2) dimetylo(pentan-3-ylideno)-λ^4-sulfan

Tę metodę można stosować do analogicznych związków selenowych i tellurowych.

P-74.2.1.2 Oksydy (tlenki) amin, oksydy (tlenki) imin i ich chalkogenowe analogi

Oksydy (tlenki) amin i oksydy (tlenki) imin mają ogólne wzory, odpowiednio, $R_3N^+\text{-}O^-$ i $R_2{=}N^+\text{-}O^-$; ich chalkogenowe analogi są sulfidami amin, selenidami imin, etc. (gdzie O jest zastąpione, odpowiednio, przez S, Se, lub Te). Związki te można nazywać:

(1) jako związki zwitterjonowe;
(2) nomenklaturą klasowo-funkcyjną używając klasowo-funkcyjnej nazwy ‘oksyd’, ‘sulfid’, ‘selenid’ lub ‘telluryd’.

Kiedy występuje jeden oksyd aminy metoda (2) prowadzi do preferowanych nazw IUPAC. Kiedy występują dwa oksydy amin, do utworzenia preferowanej nazwy IUPAC używa się λ-konwencji (patrz P-62.5). Zwitterjonowe nazwy związków nigdy nie są preferowanymi nazwami IUPAC (patrz P-62.5).

Przykład:

$(CH_3)_3N^+\text{-}O^-$

(2) *N*-oksyd *N*,*N*-dimetylometanoaminy (PIN)
N- oksyd (trimetylo)aminy
(1) (trimetyloazaniumylo)oksydanid
(trimetyloamoniumylo)oksydanid

P-74.2.1.3 Aminy imidów

Aminy imidów (nie aminy imin) mają ogólny wzór: $R_3N^+\text{-}N^-\text{-}R$; można je nazywać dwoma metodami:

(1) jako zwitterjony oparte na hydrazynie (aby nie rozrywać łańcucha azotowego)

(2) nomenklaturą klasowo-funkcyjną używając nazwy klasowej ‘imid’ umieszczanej przed nazwą aminy.

Metoda (1) prowadzi do preferowanych nazw IUPAC.

Przykład:

$(CH_3)_2\overset{+}{\underset{2}{N}}H\text{-}\overset{-}{\underset{1}{N}}\text{–}CH_3$

(1) 1,2,2-trimetylohydrazyn-2-ium-1-id (PIN)
1,2,2-trimetylodiazan-2-ium-1-id
(2) *N*-metyloimid *N*-metylometanoaminy
N-metyloimid dimetyloaminy

P-74.2.1.4 Tlenki fosfin i chalkogenowe analogi

Tlenki (oksydy) fosfin mają ogólny wzór: $R_3P^+\text{-}O^- \leftrightarrow R_3P{=}O$. Chalkogenowymi analogami są sulfidy fosfin, selenidy fosfin i tellurydy fosfin (gdzie O jest zastąpione, odpowiednio, przez S, Se lub Te). Można je nazywać trzema metodami:

(1) jako związki zwitterjonowe;
(2) nomenklaturą klasowo-funkcyjną używając nazw klas oksyd, sulfid, selenid lub telluryd;
(3) podstawnikowo, jako heterony, używając przyrostek ‘-on’ i λ^5-fosfan jako macierzysty wodorek.

Metoda (3) prowadzi do preferowanych nazw IUPAC.

Przykład:

$(C_6H_5)_3P^{+}\text{-}O^{=}$	(3) trifenylo-λ^5-fosfanon (PIN) (2) oksyd trifenylofosfanu (1) (trifenylofosfaniumylo)oksydanid (trifenylofosfoniumylo)oksydanid

Te metody są także stosowane do oksydów (tlenków) arsyn i stybin, sulfidów, etc.

P-74.2.1.5 Fosfiny imidów

Fosfiny imidów mają ogólną strukturę: $R_3P^{+}\text{-}N^{-}\text{-}R \leftrightarrow R_3P{=}N\text{-}R$. Można je nazywać na trzy sposoby:

(1) jako związki zwitterjonowe;

(2) nomenklaturą klasowo-funkcyjną, używając nazwę klasy imid;

(3) podstawnikowo, jako heteroiminy, używając przyrostka ‘imina’ i λ^5-fosfan jako macierzysty wodorek.

Metoda (3) prowadzi do preferowanych nazw IUPAC.

Przykład:

$(C_6H_5)_3P^{+}\text{–}N^{-}\text{–}CH_2\text{-}CH_3$

(3) *N*-etylo-*P,P,P*-trifenylo-λ^5-fosfanoimina (PIN)
(2) etylo(trifenylofosfaniumylo)azanid
(1) *N*-etyloimid trifenylofosfanu
imid *N*-etylo-*P,P,P*-trifenylofosfanu
imid *N*-etylo-*P,P,P*-trifenylofosfiny

Te metody stosuje się również do imidów arsyn i stybin.

P-74.2.2 Związki 1,3-dipolarne

Określenie związki 1,3-dipolarne używa się dla związków, w których znaczącą strukturę kanoniczną można przedstawić przez rozdzielenie ładunku na trzy atomy. Podklasa związków 1,3-dipolarnych obejmuje:

P-74.2.2.1 typ allilu (propenylu)
P-74.2.2.2 typ propargilu (prop-2-yn-1-ylu)
P-74.2.2.3 typ karbenu

P-74.2.2.1 Związki typu allilowego mają następującą zdelokalizowaną ogólną strukturę, gdzie Y i/albo Z = C, N lub O; X = N lub O:

$$Z{=}X^{+}\text{-}Y^{-} \leftrightarrow Z^{-}\text{-}X^{+}{=}Y \leftrightarrow Z^{+}\text{-}X\text{-}Y^{-} \leftrightarrow Z^{-}\text{-}X\text{-}Y^{+}$$

Preferowane nazwy IUPAC opierają się na pierwszej kanonicznej formie, chociaż, jeśli zachodzi potrzeba, można nazwać każdą kanoniczną formę. Nazwy tworzy się na cztery różne sposoby:

(1) używając macierzysty wodorek do utworzenia zwitterjonu;
(2) podstawiając kationowy podstawnik do macierzystego anionu;
(3) nomenklaturą klasowo-funkcyjną używając nazwy klas imid, oksyd, etc.
(4) stosując λ-konwencję.

Preferowanymi nazwami IUPAC są nazwy wyrażające zwitterjonowy charakter związków. Bierze się pod uwagę trzy wyjątki:

(1) oksydy (tlenki) heteroatomu jak opisano w P-74.2.2.1.4 dla azoksy związków i jak opisano w P-74.2.2.1.9 dla nitronów.

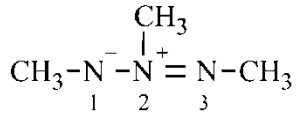
(2) użycie λ-konwencji jak w P-74.2.2.1.8 dla *S*-oksydów heteronu.

P-74.2.2.1.1 Azo imidy, analogiczne do azoksy związków, mają następującą zdelokalizowana ogólną strukturę:

$$RN{=}N^{+}(R){-}N^{-}{-}R \leftrightarrow RN^{-}{-}N^{+}(R){=}NR$$

Metoda (1) z P-74.2.2.1 daje preferowane nazwy IUPAC.

Przykład:



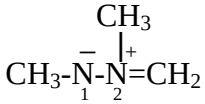
1,2,3-trimetylotriaz-2-en-2-ium-1-id (PIN; preferowana nazwa opiera się na nieprzerwanym łańcuchu azotowym)
metyloimid dimetylodiazenu
imid trimetylodiazenu
[metylo(metyloimino)amoniumylo]metanoaminid

P-74.2.2.1.2 Imidy azometyn mają następującą zdelokalizowaną ogólną strukturę:

$$R{-}N^{-}{-}^{+}N(R){=}CR_2 \leftrightarrow R{-}N{=}N^{+}(R){-}C^{-}R_2$$

Metoda (1) w P-74.2.2.1 daje preferowane nazwy IUPAC.

Przykład:



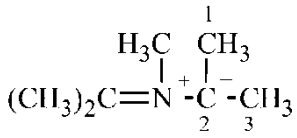
1,2-dimetylo-2-metylidenohydrazyn-2-ium-1-id (PIN)
metyloimid *N*-metylometanoiminy

P-74.2.2.1.3 Ylidy azometyn mają następującą zdelokalizowaną ogólną strukturę:

$$R_2C^{-}{-}N^{+}(R){=}CR_2 \quad \leftrightarrow \quad R_2C{=}N^{+}(R){-}C^{-}R_2$$

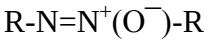
Metoda (2) z P-74.2.2.1 daje preferowane nazwy IUPAC.

Przykład:



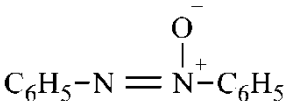
2-[metylo(propan-2-ylideno)azaniumylo]propan-2-id (PIN)
2-[metylo(propan-2-ylideno)amoniumylo]propan-2-id

P-74.2.2.1.4 Związki azoksy mają ogólną strukturę:



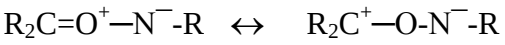
(patrz także P-68.3.1.3.3.1). Metoda (3) z P-74.2.2.1 daje preferowane nazwy IUPAC.

Przykład:



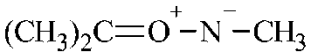
oksyd difenylodiazenu (PIN)
(difenylodiazeniumylo)oksydanid
azoksybenzen
1,2-difenylo-1λ^5-diazen-1-on

P-74.2.2.1.5 Imidy karbonyli mają następującą zdelokalizowaną ogólną strukturę:



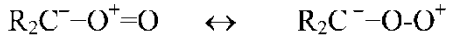
Metoda (2) w P-74.2.2.1 daje preferowane nazwy IUPAC.

Przykład:



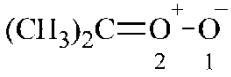
N-[(propano-2-ylideno)oksydaniumylo]metanoaminid (PIN)
N-[(propano-2-ylideno)oksoniumylo]metanoaminid
metyloimid propan-2-onu
imid *N*-metylopropan-2-onu

P-74.2.2.1.6 Oksydy karbonyli mają następującą zdelokalizowaną ogólna strukturę:



Metoda (1) z P-74.2.2.1 daje preferowane nazwy IUPAC.

Przykład:



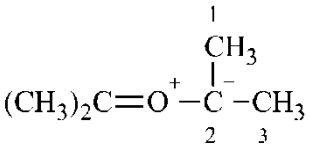
2-(propan-2-ylideno)dioksydan-2-ium-1-id (PIN)
oksyd propan-2-onu

P-74.2.2.1.7 Ylidy karbonyli mają następującą zdelokalizowaną ogólną strukturę:

$$R_2C{=}O^{+}{-}C^{-}(R_2) \quad \leftrightarrow \quad R_2C^{+}{-}OC^{-}(R)_2$$

Metoda (2) z P-74.2.2.1 daje preferowane nazwy IUPAC

Przykład:



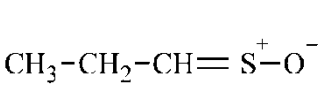
2-[(propan-2-ylideno)oksydaniumylo]propan-2-id (PIN)
2-[(propan-2-ylideno)oksoniumylo]propan-2-id

P-74.2.2.1.8 *S*-Oksydy tioaldehydów, *S*-oksydy tioketonów i *S*-oksydy heteronów mają następującą zdelokalizowaną strukturę:

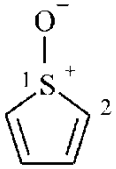
$$RR'C{=}S^{1}{-}O^{-} \quad \leftrightarrow \quad RR'C{=}S{=}O \qquad \text{(gdzie R′ = lub} \neq \text{H)}$$

Metoda (4) z P-74.2.2.1 daje preferowane nazwy IUPAC.

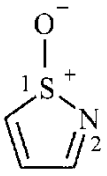
Przykłady:



propylideno-λ^4-sulfanon (PIN)
oksyd propanotialu
(propylidenosulfaniumylo)oksydanid
1-(okso-λ^4sulfanylideno)propan



1*H*-1λ^4-tiofen-1-on (PIN)
oksyd tiofenu
(tiofen-1-ium-1-ylo)oksydanid
1-okso-1λ^4-tiofen



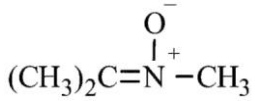
1*H*-1λ^4,2-tiazyn-1-on (PIN)
1-oksyd 1,2-tiazyny
S-oksyd 1,2-tiazyny

P-74.2.2.1.9 Nitrony mają następującą zdelokalizowaną strukturę:

$$R_2C{=}N^{+}(O^{-})R' \leftrightarrow R_2C^{+}\text{-}N(O^{-})R'$$

gdzie R′ ≠ H (związki, w których R = H nie są włączone do tej klasy).
Metoda (3) z P-74.2.2.1 daje preferowane nazwy IUPAC.

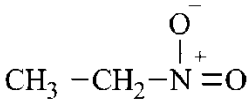
Przykład:



N-oksyd *N*-metylopropano-2-iminy (PIN)
[metylo(propan-2-ylideno)azaniumylo]oksydanid

P-74.2.2.1.10 Nitrozwiązki nazywa się biorąc za podstawę tradycyjną strukturę, R-NO_2 i używając obowiązujący przedrostek ‘nitro’ (patrz P-61.5.1).

Przykład:



$\leftrightarrow$ CH_3-CH_2-NO_2

nitroetan (PIN)

P-74.2.2.1.11 Typ propargilu (propynylu) obejmuje związki mające następujące rezonansowe kanoniczne formy:

$$X{\equiv}N^{+}\text{-}Z^{-} \leftrightarrow {}^{-}X{=}N^{+}{=}Z \leftrightarrow {}^{-}X{=}N\text{-}Z^{+} \leftrightarrow X\text{-}N{=}Z$$

gdzie X = C lub O i Z = C. N lub O

P-74.2.2.2.1 Imidy nitryli, oksydy nitryli i chalkogenowe analogi oraz ylidy nitryli można nazywać na dwa różne sposoby:

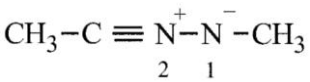
(1) jako związki zwitterjonowe, bez rozrywania najdłuższego łańcucha heteroatomów;

(2) nomenklaturą klasowo-funkcyjną, używając nazwy klas: imid, oksyd, sulfid, etc.

P-74.2.2.2.1.1 Imidy nitryli

Metodą (1) z P-74.2.2.2.1, tworzy się preferowane nazwy IUPAC jako związków zwitterjonowych

Przykład:

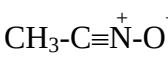


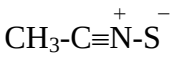
2-etylidyno-1-metylohydrazyn-2-ium-1-id (PIN)
metyloimid acetonitrylu

P-74.2.2.2.1.2 Oksydy nitryli i chalkogenowe analogi

Metoda (2), nazw klasowo-funkcyjnych, daje preferowane nazwy IUPAC. (patrz także P-66.5.3.1).

Przykłady:





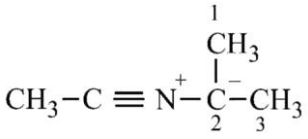
oksyd acetonitrylu (PIN)
(etylidenoazaniumylo)oksydanid

sulfid acetonitrylu (PIN)
(etylidynoazaniumylo)sulfanid

P-74.2.2.2.1.3 Ylidy nitryli

Metoda (1) z P-74.2.2.2.1, nazw zwitterjonowych, daje preferowane nazwy IUPAC.

Przykład:



2-(etylidynoazaniumylo)propan-2-id (PIN)
2-(etylidynoamoniumylo)propan-2-id

P-74.2.2.2.2 Azydki nazywa się trzema metodami:

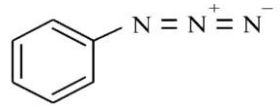
(1) podstawnikowo, używając obowiązujący przedrostek azydo (P-61.6);

(2) nomenklaturą klasowo-funkcyjną używając nazwy klasowej azydek;

(3) jako pochodne zwitterjonowego macierzystego wodorku ‘triazadien-2-ium-1-id’.

Metoda (1) daje preferowane nazwy IUPAC (patrz także P-61.7).

Przykład:



azydobenzen PIN)
azydek fenylu
1-fenylotriazadien-2-ium-1-id

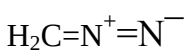
P-74.2.2.2.3 Diazozwiązki można nazywać na dwa sposoby:

(1) podstawnikowo, stosując wymagany przedrostek (patrz P-61.4);

(2) jako pochodne zwitterjonowego macierzystego wodorku diazen-2-ium-1-idu.

Metoda (1) prowadzi do preferowanych nazw IUPAC (patrz także P-61.4).

Przykład:



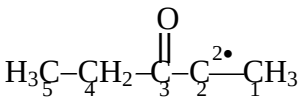
diazometan (PIN)
metylidenodiazen-2-ium-1-id

P-74.2.2.3 Typ karbenu obejmuje związki mające następujące formy kanoniczne:

$$X\text{-}C{=}Z \leftrightarrow {}^{+}X{=}C\text{-}Z^{-}, \text{ gdzie X = C lub N i Z = C, N lub O}$$

P-74.2.2.3.1 Acylowe karbeny mają ogólną strukturę acyl-$C^{2\bullet}$-R. W chemii organicznej nieokreślony acylowy karben na ogół jest karbenem karbonylowym i może być nazywany, z użyciem najdłuższego łańcucha węglowego, zgodnie z zasadami nomenklatury podstawnikowej dla rodników (patrz P-44.6), dając pierwszeństwo rodnikowi wymienianemu jako przyrostek.

Przykład:



3-oksopentan-2-yliden (PIN)

P-74.2.2.3.2 Imidoilowe karbeny

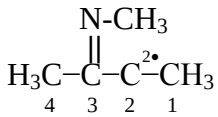
Związki o strukturze $RC(=NH)C^{2\bullet}$ nazywa się imidoilowymi karbenami. Imidoil jest skróconym, ale nieprecyzyjnym, określeniem dla karboksyimidoilu, RC(=NH)-. Te karbeny można nazywać dwiema metodami:

(1) Według zasad nomenklatury podstawnikowej dla rodników, używając najdłuższy łańcuch węglowy. Niskie lokanty przypisuje się rodnikowi wymienianemu jako przyrostek;

(2) podstawnikowo biorąc za podstawę odpowiedni karben jako strukturę macierzystą.

Metoda (1) prowadzi do preferowanych nazw IUPAC.

Przykład:



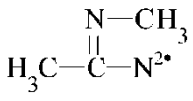
3-(metyloimino)butan-2-yliden (PIN)

P-74.2.2.3.3 Imidoilowe nitreny mają następującą ogólną strukturę;

$$RC(=N\text{-}R')N^{2\bullet} \leftrightarrow RC(=N^{-}\text{–}R')=N^{+}$$

Można je nazywać podstawnikowo używając macierzystej nazwy azanyliden, nitren lub aminylen. Użycie ‘azanyliden’ prowadzi do preferowanych nazw IUPAC.

Przykład:

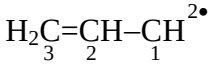


(*N*-metyloetanoimidoilo)azanyliden (PIN)
(*N*-metyloacetoimidoilo)nitren
(*N*-metyloacetoimidoilo)aminylen

P-74.2.2.3.4 Winylowe (etenylowe) karbeny mają strukturę: $RR'=CR''\text{-}C^{2\bullet}\text{-}R'''$.

Preferowane nazwy IUPAC tworzy się wykorzystując najdłuższy łańcuch węglowy zgodnie z zasadami nomenklatury podstawnikowej dla rodników . Niskie lokanty przypisuje się przyrostkowi ‘yliden’.

Przykład:

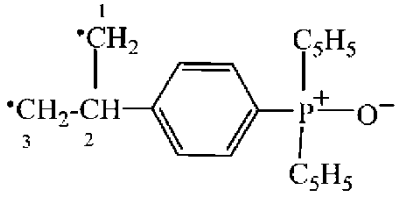


prop-2-en-1-yliden (PIN)

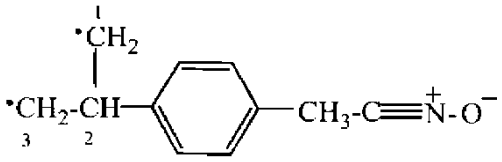
P-74.2.3 Dipolarne podstawniki

Nazwy dipolarnych podstawników tworzy się używając przedrostków do nazwania jonów jako podstawników i oznaczając wolne walencyjności przyrostkami ‘yl’ (‘il’), yliden lub ‘ylidyn’.

Przykłady:



2-{4-[oksydo(difenylo)fosfaniumylo]fenylo}propano-1,3-diyl (PIN)
2-{4-[oksydo(difenylo)fosfoniumylo]fenylo}propano-1,3-diyl



2-{4-[2-(oksydoazaniumylidyno)etylo]fenylo}propano-1,3-diyl (PIN)
2-{4-[2-(oksydoamoniumylidyno)etylo]fenylo}propano-1,3-diyl

P-75 JONORODNIKI

Do celów nomenklatury organicznej jonorodnik jest molekularnym indywiduum mającym co najmniej jedno centrum rodnikowe i jedno centrum jonowe, które mogą być ulokowane na tym samym lub różnych atomach macierzystej struktury. W poniższych podrozdziałach opisany jest formalny sposób ich nazywania.

P-75.1 Jonorodniki utworzone przez dodanie lub oderwanie elektronów
P-75.2 Jonorodniki pochodzące z macierzystych wodorków
P-75.3 Jonorodniki w grupach charakterystycznych
P-75.4 Jonowe i rodnikowe centra w różnych strukturach macierzystych

P-75.1 JONORODNIKI UTWORZONE PRZEZ DODANIE LUB USUNIĘCIE ELEKTRONU

Jonorodniki utworzone przez dodanie lub oderwanie elektronów można nazywać na dwa sposoby:

(1) stosując przyrostki ‘elid’ i ‘elium’ w nomenklaturze podstawnikowej, za pomocą której jonorodniki formalnie utworzone z obojętnych wodorków macierzystych, związków macierzystych lub ich hydro pochodnych przez dodanie lub usunięcie elektronów można nazywać dodając przyrostki ‘elid’ lub ‘elium’ do nazwy struktury

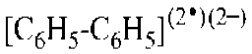
macierzystej. Liczbę dodanych lub usuniętych elektronów określa się numerycznymi przedrostkami, ‘di’, ‘tri’, etc.

Uwaga: Ta nowa metoda może być użyta do opisu ogólnej struktury, gdy nie są znane pozycje centrów rodnikowych i jonowych albo, kiedy nie jest ani konieczne ani pożądane nazwanie określonej struktury. Te przyrostki nie mogą być zastosowane w obecności innych przyrostków.

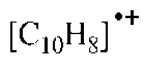
(2) nomenklaturą klasowo-funkcyjną, za pomocą której jonorodniki formalnie utworzone z obojętnych macierzystych wodorków, macierzystych związków lub ich hydro pochodnych przez dodanie lub usunięcie elektronów można nazywać dodając określenia ‘kationorodnik’ lub ‘anionorodnik’, jako odrębne słowa, przed nazwą obojętnego macierzystego wodorku lub związku macierzystego mających ten sam wzór cząsteczkowy; przedrostki zwielokrotniające ‘di’, ‘tri’, etc. są używane do wskazania krotności centrów rodnikowych lub jonowych. Za określeniem ‘jonorodnik’ może być podana liczba ładunków ze wskazaniem właściwego znaku.

Metoda podstawnikowa (1) daje preferowane nazwy IUPAC.

Przykłady:



[1,1′-bifenylo]dielid (PIN)
dianionodirodnik bifenylu
jono(2-)dirodnik bifenylu



azulenelium (PIN)
kationorodnik azulenu
jono(1+)rodnik azulenu

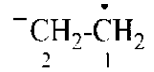
P-75.2 JONORODNIKI POCHODZĄCE Z MACIERZYSTYCH WODORKÓW

Porządek starszeństwa: rodniki > aniony > kationy znajduje odbicie w preferowanych nazwach IUPAC. Przyrostki przypisane centrom anionowym i/lub kationowym umieszcza się jako pierwsze po nazwie macierzystej struktury (macierzysty wodorek, funkcyjny macierzysty wodorek lub sfunkcjonalizowany macierzysty wodorek) a po nich przyrostki przypisane centrom rodnikowym.

Jonorodnik formalnie utworzony przez usunięcie jednego lub więcej atomów wodoru z pojedynczego atomu szkieletu lub różnych atomów szkieletu jonowego lub zwitterjonowego macierzystego wodorku nazywa się dodając do jego nazwy przyrostków ‘yl’ (‘il’) lub ‘yliden’ z odpowiednimi przedrostkami zwielokrotniającymi przed ‘yl’ lub ‘yliden’. Pozycjom szkieletu z centrami rodnikowymi przyznaje się niskie lokanty, przed centrami jonowymi.

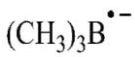
P-75.2.1 Przykłady anionorodników:

aminidyl (nazwa wstępnie wybrana)

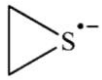


etan-2-id-1-yl (PIN)

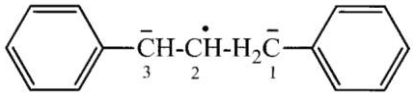
azanidyl



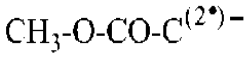
trimetyloboranuidyl (PIN)
trimetylo-1λ^5-boranidyl



1λ^4-tiiran-1-id-1-yl (PIN)



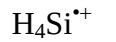
1,3-difenylopropan-1,3-diid-2-yl (PIN)



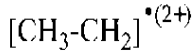
(metoksykarbonylo)metanidyliden (PIN)

P-75.2.2 Przykłady kationorodników

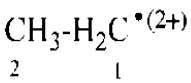
metyliumyl (PIN)



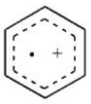
silaniumyl (nazwa wstępnie wybrana)

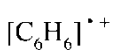


etaniumyliumyl (PIN)
(ulokowanie rodnikowego i jonowego centrum jest nieznane)

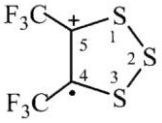


etan-1-ium-1-ylium-1-yl
(pozycje rodnikowego i jonowego centrum są wskazane lokantami)



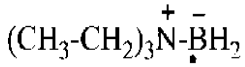
albo 

benzenelium (PIN)
benzeniumyl

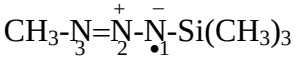


4,5-bis(trifluorometylo)-1,2,3-tritiolan-5-ylium-4-yl

P-75.2.3 Przykłady zwitterjonowych rodników jonów:



(trietyloazaniumylo)boranuidyl (PIN)

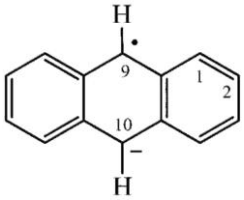


3-metylo-1-(trimetylosililo)triaz-2-en-2-ium-1-id-2-yl (PIN)

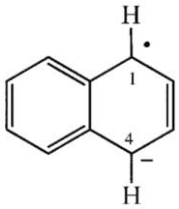
P-75.2.4 ‘Dodany wskazany atom wodoru’

Rodnikowe i jonowe centra w pozycjach macierzystych wodorków mancude gdzie nie ma wystarczającej liczby atomów wodoru żeby bezpośrednio zastosować zalecenia dotyczące używania ‘yl’, ‘yliden’, ‘id’ lub ‘ylium’ jak podano, odpowiednio, w P-72.1 i P-72.2, są formalnie utworzone z dihydro pochodnej cyklicznego macierzystego wodorku. Jonorodniki można także opisać z zastosowaniem zasady ‘dodany wskazany atom wodoru’ (patrz P-14.7 i P-58.2.2). W tej metodzie pochodną ‘hydro’ opisuje się przez określenie atomu wodoru z pary dihydro, który pozostaje po utworzeniu centrum rodnikowego. W tym celu wymienia się kursywą dużą literę *H* i lokant atomu szkieletu, do którego dołączony jest atom wodoru, oba symbole ujęte w nawias umieszcza się w nazwie odpowiedniego macierzystego wodorku bezpośrednio za lokantem centrum rodnikowego. Następnie, oderwanie hydronu tworzy centrum jonowe. Dla jasności nazw ‘dodany atom wodoru’ jest wymieniany w nazwach. Preferowane nazwy IUPAC są tworzone metodą ‘dodany wskazany atom wodoru’ (patrz P-58.2).

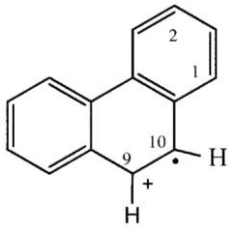
Przykłady:



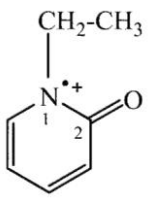
9,10-dihydroantracen-10-id-9-yl (PIN)



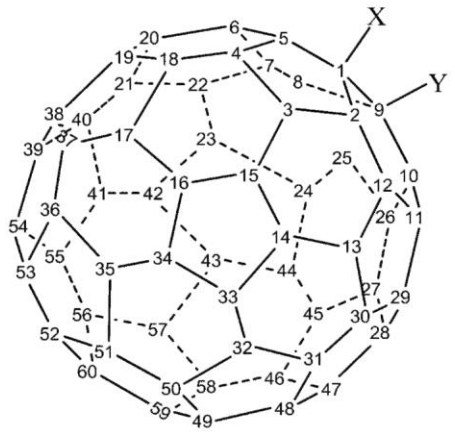
1,4-dihydronaftalen-4-id-1-yl (PIN)



9,10-dihydrofenantren-10-ylium-9-yl (PIN)



1-etylo-2-oksopirydyn-1-ium-1(2*H*)-yl (PIN)
1-etylo-2-okso-1,2-dihydropirydyn-1-ium-1-yl



X = • ; Y = +

(C_{60}-*I*$_h$)[5,6]fulleren-9-ulium-1(9*H*)-yl (PIN)
1,9-dihydro(C_{60}-*I*$_h$)[5,6]fulleren-1,9-diyl

X = • ; Y = −

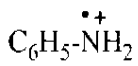
(C_{60}-*I*$_h$)[5,6]fulleren-9-id-1(9*H*)-yl (PIN)
1,9-dihydro(C_{60}-*I*$_h$)[5,6]fulleren-9-id-1-yl

P-75.3 JONORODNIKI W GRUPACH CHARAKTERYSTYCZNYCH

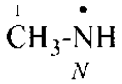
P-75.3.1 Jonorodniki w grupach wskazanych jonowym przyrostkiem

Kiedy jony można nazywać z użyciem modyfikowanych przyrostków (patrz P-73.1.2.1 i P-72.2.2.2.3), przyrostki wskazujące centrum rodnikowe dodaje się do nazwy jonowego macierzystego wodorku.

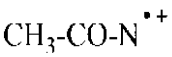
Przykłady:



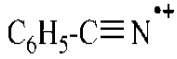
benzenoaminiumyl (PIN)



metanoaminidyl (PIN)



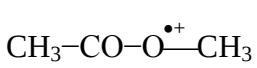
acetamidyliumyl (PIN)



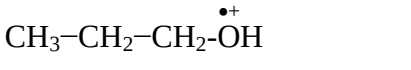
benzonitryliumyl (PIN)

P-75.3.2 Jonorodniki inne niż nazywane z użyciem jonowego przyrostka grup

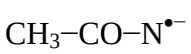
Przykłady:



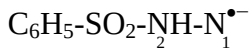
acetylo(metylo)oksydaniumyl (PIN)



propylooksydaniumyl (PIN)



acetyloazanidyl (PIN)



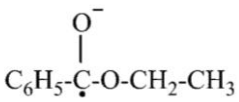
2-(benzenosulfonylo)hydrazyn-1-id-1-yl (PIN)
2-(benzenosulfonylo)diazan-1-id-1-yl

P-75.4 JONOWE I RODNIKOWE CENTRA W RÓŻNYCH MACIERZYSTYCH STRUKTURACH

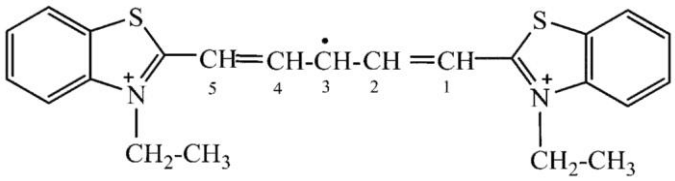
Centra rodnikowe mają pierwszeństwo przed centrami jonowymi. Jonorodnik formalnie otrzymany przez oderwanie jednego lub więcej atomów wodoru z jonowego lub zwitterjonowego związku, w którym centra jonowe i rodnikowe nie mogą być objęte tą samą macierzystą strukturą nazywa się wyrażając jonowe centrum (centra), albo część struktury zawierającą jonowe centrum (centra), za pomocą przedrostków podstawników dołączonych do nazwy macierzystego rodnika.

Przykłady:

oksydaniumylidynoetyl (PIN)



α-etoksy-α-oksydobenzyl (PIN)



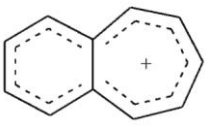
1,5-bis(3-etylo-1,3-benzotiazol-3-ium-2-ylo)penta-1,4-dien-3-yl (PIN)

P-76 ZDELOKALIZOWANE RODNIKI I JONY

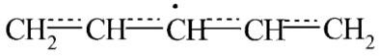
P-76.1 DELOKALIZACJA W NAZWIE DOTYCZĄCEJ JEDNEGO CENTRUM RODNIKOWEGO LUB JONOWEGO W STRUKTURZE Z OBECNYMI PONADTO SPRZĘŻONYMI WIĄZANIAMI PODWÓJNYMI JEST WSKAZYWANA ODPOWIEDNIM PRZYROSTKIEM BEZ LOKANTÓW.

Przykłady:

X = • : cyklopentadienyl (PIN)
X = + : cyklopentadienylum (PIN)
X = − : cyklopentadienid



benzo[7]annulenylium (PIN)



pentadienyl (PIN)

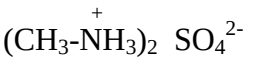
P-77 SOLE

P-77.1 PREFEROWANE NAZWY DLA SOLI ZASAD ORGANICZNYCH

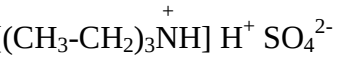
P-77.1.1 Preferowane nazwy IUPAC soli zasad organicznych są nazwami składającymi się z dwóch słów, nazwy anionu a następnie kationu.

Przykłady:

anilinium chloride (PIN)
chlorek benzenoaminium



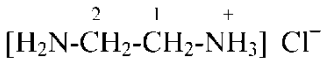
siarczan bis(metanoaminium) (PIN)



siarczan wodoru-*N*,*N*-dietyloetanoaminium (PIN)

P-77.1.2 Do wyprowadzenia preferowanej nazwy IUPAC monosoli di- lub poliamin używa się nomenklatury podstawnikowej. W ogólnej nomenklaturze mogą być użyte nazwy typu adduktów (patrz P-77.1.3).

Przykład:



chlorek 2-aminoetano-1-aminium (PIN)
monohydrochlorek etano-1,2-diaminy

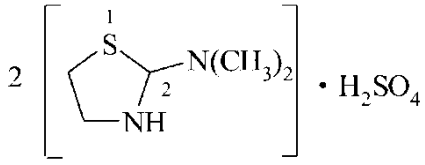
P-77.1.3 Kiedy nie może być użyte zalecenie z P-77.1.2, stosuje się trzy tradycyjne metody nazywania soli organicznych zasad w następujący sposób:

(1) jako addukty, prowadzi to do preferowanych nazw IUPAC;

(2) niezmieniona nazwa zasady, a za nią nazwa anionu;

(3) sole tylko kwasów hydrohalogenowych; niezmieniona nazwa zasady poprzedzana określeniem, odpowiednio, fluorowodorek, bromowodorek, chlorowodorek lub jodowodorek.

Przykład:

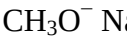


(1) *N*,*N*-dimetylo-1,3-tiazolidyno-2-amina─kwas siarkowy (2/1) (PIN)
(2) siarczan bis(*N*,*N*-dimetylo-1,3-tiazolidyno-2-aminy)

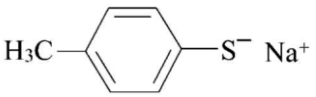
P-77.2 SOLE UTWORZONE Z ALKOHOLI (WŁĄCZAJĄC FENOLE), PEROKSOLI I ICH CHALKOGENOWYCH ANALOGÓW

P-77.2.1 Preferowane nazwy IUPAC są podwójnymi nazwami tworzonymi przez wymienienie nazwy anionu a po niej kationu (patrz P-72.2.2.2.2).

Przykład:



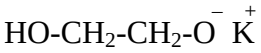
metanolan sodu (PIN)
metoksylan sodu (nazwa zachowana)



4-metylobenzeno-1-tiolan sodu (PIN)

P-77.2.2 Do utworzenia preferowanej nazwy IUPAC monosoli polihydroksylowych związków używa się nomenklatury podstawnikowej.

Przykład:

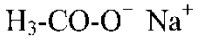


2-hydroksyetan-1-olan potasu (PIN)

P-77.3 SOLE UTWORZONE Z KWASÓW ORGANICZNYCH

P-77.3.1 Preferowane nazwy IUPAC są nazwami podwójnymi tworzonymi przez wymienienie nazwy anionu a po niej kationu (patrz P-72.2.2.2.2).

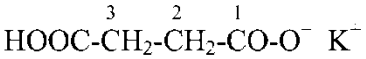
Przykład:



octan sodu (PIN)

P-77.3.2 Do utworzenia preferowanych nazw IUPAC soli wielozasadowych organicznych kwasów (patrz P-65.6.2.3) używana jest nomenklatura podstawnikowa. W ogólnej nomenklaturze można stosować metodę wodorosoli lub opisowego określenia.

Przykład:



3-karboksypropanian potasu (PIN)
sól monopotasowa kwasu butanodiowego

ROZDZIAŁ P-8. ZWIĄZKI MODYFIKOWANE IZOTOPOWO

P-80 Wprowadzenie
P-81 Symbole i definicje
P-82 Związki podstawione izotopowo
P-83 Związki znakowane izotopowo
P-84 Przykłady porównawcze wzorów i nazw związków zmodyfikowanych izotopami

P-80 WPROWADZENIE

Rozdział niniejszy opisuje ogólne zasady nomenklatury związków organicznych, w których skład izotopowy nuklidów (odn. 12, 14 i 22) odbiega od występującego w naturze (dyskusja znaczenia „naturalny skład" w odn. 29)). Porównawcze przykłady zastosowania tych reguł są podane poniżej w Tabeli 8.1. Rozdział P-8 wywodzi się z zaleceń z Części H w *Nomenklaturze Związków Organicznych* z 1979 r. (odn. 1) oraz z rozdziału R-8 P*rzewodnika do nomenklatury związków organicznych. Zalecenia 1993* (2). Obecne zalecenia zastępują zarówno te z 1979 jak i z 1993 roku. Krótkie omówienie zwyczajów upowszechnionych w nazewnictwie biochemicznym można z kolei znaleźć w odnośniku 30.

Istnieje jeszcze jeden system stosowany do opisu związków modyfikowanych izotopowo. Jest on oparty na rozszerzeniu zasad proponowanych przez Boughtona (patrz odn. 31) do opisu związków zawierających izotopy wodoru i stosowany głównie w systemie *Chemical Abstracts Service Index Nomenclature* (odn. 32) do opisu podstawienia izotopowego, ale nie do znakowania izotopowego.

Ujednolicony system przedstawiony w niniejszych zaleceniach pozwala na rozpoznanie różnych typów modyfikacji izotopowych i dlatego został wybrany zamiast systemu opartego na zasadach Boughtona, które dotyczą wyłącznie związków podstawionych izotopowo.

P-81 SYMBOLE I DEFINICJE

P-81 SYMBOLE NUKLIDÓW

Symbol dla oznaczenia nuklidu we wzorze i nazwie związku modyfikowanego izotopowo składa się z symbolu atomu danego pierwiastka i arabskiej liczby w pozycji lewego indeksu górnego wskazującego liczbę masową nuklidu (patrz IR-3.2, odn. 12).

P-81.1 SYMBOLE ATOMÓW

Symbole atomów użytych w symbolach nuklidów są podane w wydawnictwie IUPAC *Nomenclature of Inorganic Chemistry* (odn. 12). W symbolu nuklidu symbol atomu jest drukowany czcionką romańską, pozostawiając kursywę na lokanty literowe, jak to jest zwyczajowo przyjęte w nomenklaturze związków organicznych i opisane w P-14.1.

Dla izotopów wodoru takich jak prot, deuter i tryt, symbolami nuklidów są ^{1}H, ^{2}H i ^{3}H. Symbole D i T dla ^{2}H i ^{3}H odpowiednio, są stosowane, lecz nie wówczas, gdy w związku obecne są inne modyfikowane nuklidy, ponieważ może to powodować trudności w alfabetycznym uszeregowaniu symboli nuklidów w deskryptorze izotopowym. Chociaż symbole *d* i *t* były i są wciąż używane zamiast ^{2}H i ^{3}H w nazwach tworzonych zgodnie z systemem Boughtona (odn. 31), w

żadnym jednak innym przypadku nie stosuje się małych liter jako symboli atomów. Tym samym, stosowanie *d* i *t* w nomenklaturze chemicznej, poza systemem Boughtona, nie jest zalecane.

P-81.3 NAZWY ATOMÓW I JONÓW WODORU (patrz odn. 30,33)

Tabela 8.1 Nazwy atomów i jonów wodoru

		^{1}H	**^{2}H**	**^{3}H**	**skład naturalny**
atom	H	prot	deuter	tryt	wodór
anion	H^-	protyd	deuteryd	trytyd	hydryd
kation	H^+	proton	deuteron	tryton	hydron

P-81.4 ZWIĄZKI IZOTOPOWO NIEZMODYFIKOWANE

Związek niezmodyfikowany izotopowo ma skład makroskopowy, wynikający z proporcji, w jakich jego składowe nuklidy występują w naturze. Wzór i nazwa związku są zapisywane w sposób zwyczajowy.

Przykłady:

CH_4	CH_3-CH_2-OH
metan	etanol

P-81.5 ZWIĄZKI IZOTOPOWO MODYFIKOWANE

Związek zmodyfikowany izotopowo ma skład makroskopowy, w którym stosunek izotopowy nuklidów, przynajmniej dla jednego pierwiastka, odbiega wymiernie od występującego w naturze. Izotopowo modyfikowane związki można podzielić na:

(1) związki podstawione izotopowo
(2) związki znaczone izotopowo

P-82 ZWIĄZKI IZOTOPOWO PODSTAWIONE

P-82.0 Wprowadzenie
P-82.1 Wzory
P-82.2 Nazwy
P-82.3 Kolejność symboli nuklidów
P-82.4 Stereoizomeryczne związki podstawione izotopowo
P-82.5 Numeracja
P-82.6 Lokanty

P-82.0 WPROWADZENIE

Związek podstawiony izotopowo ma skład, w którym w zasadzie wszystkie cząsteczki związku mają tylko wskazany nuklid w każdej oznaczonej pozycji. Brak wskazanego nuklidu we wszystkich innych pozycjach oznacza, że skład izotopowy nuklidu jest taki sam jak w naturze.

P-82.1 STRUKTURY

Strukturę związku podstawionego izotopowo opisuje się wzorem w zwykły sposób z tym wyjątkiem, że używa się właściwych symboli nuklidów. Wówczas, kiedy różne izotopy tego samego pierwiastka są obecne w tej samej pozycji, ich symbole wpisuje się w kolejności rosnących liczb masowych.

Przykłady

$^{14}CH_4$ $^{12}CHCl_3$ $CH_3\text{-}CH^2H\text{-}OH$
(nie $CH_3\text{-}C^2HH\text{-}OH$)

P-82.2 NAZWY

P-82.2.1 Nazwę związku podstawionego izotopowo tworzy się poprzez dodanie lub wstawienie symbolu(i) nuklidu(ów) wziętego(ych) w nawias okrągły, poprzedzony koniecznym lokantem(ami), literowymi i/lub liczbowymi, przed fragmentem związku, który jest podstawiony izotopowo. Po nawiasach nie ma ani łącznika ani przerwy, z wyjątkiem przypadku, gdy nazwa lub jej część zawiera poprzedzający lokant, wówczas wstawia się łącznik. Wówczas, gdy dwa lub więcej symboli nuklidów pojawia się w tym samym miejscu nazwy, i jeśli jest to konieczne, to są one wymieniane najpierw w porządku alfabetycznym, a następnie w porządku ich liczb masowych (patrz P-82.3).

Kiedy możliwe jest wielokrotne podstawienie w pojedynczej pozycji, wówczas liczba podstawionych atomów jest zawsze określona indeksem dolnym z prawej strony symbolu(i) atomu(ów), nawet w przypadku pojedynczego podstawienia.

Wielokrotne podstawienie z izotopowo modyfikowanymi i niemodyfikowanymi atomami lub grupami opisano w P-82.2.2. Związki modyfikowane przedrostkiem hydro opisano w P-82.2.3.

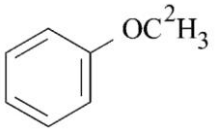
Przykłady:

$^{14}CH_4$
(^{14}C)metan (PIN)

$^{12}CHCl_3$
trichloro(^{12}C)metan (PIN)

$CH_3{}^2H$
($^2H_1$)metan (PIN)

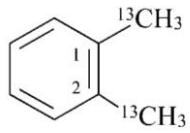
$C^2H_2Cl_2$
dichloro($^2H_2$)metan (PIN)

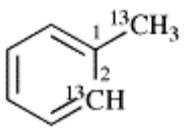


($^2H_3$)metoksybenzen (PIN)
(α,α,α-$^2H_3$)anizol

$C_6H_5\text{-}^{13}CO\text{-}^{13}CH_3$

1-fenylo(1,2-$^{13}C_2$)etan-1-on (PIN)
(1,2-^{13}C)acetofenon



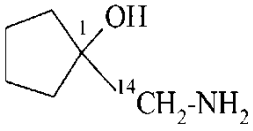


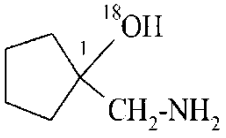
1,2-di[(^{13}C)metylo]benzen (PIN)
(α,α'-$^{13}C_2$)-1,2-ksylen
(α,α'-$^{13}C_2$)-*o*-ksylen

1-(^{13}C)metylo(2-^{13}C)benzen (PIN)
(α,2-$^{13}C_2$)-toluen

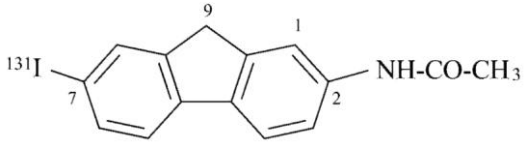
$CH_2{}^2H\text{-}CH_2\text{-}OH$ $^{13}CH_3\text{-}CH_2\text{-}OH$

(2-$^2H_1$)etan-1-ol (PIN) (2-^{13}C)etan-1-ol (PIN)

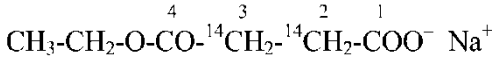




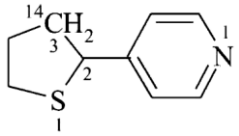
1-[amino(^{14}C)metylo]cyklopentan-1-ol (PIN) 1-(aminometylo)cyklopentan-(1-^{18}O)ol (PIN)

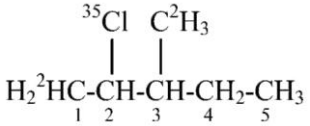


N-[(7-^{131}I)jodo-9*H*-fluoren-2-ylo]acetamid (PIN)



4-etoksy-4-okso(2,3-$^{14}C_2$)butanian sodu
(2,3-$^{14}C_2$)butanodian etylu-sodu
(2,3-$^{14}C^2$)bursztynian etylu-sodu





4-[3-^{14}C)tiolan-2-ylo]pirydyna (PIN) 2-(^{35}Cl)chloro-3-($^2H_3$)metylo(1-$^2H_1$)pentan (PIN)
4-[tetrahydro(3-^{14}C)tiofen-2-ylo]pirydyna

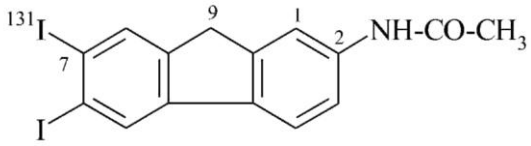
P-82.2.2 Nazwa związku modyfikowanego izotopowo może różnić się od nazwy analogu bez modyfikacji wówczas, kiedy struktura zawiera identyczne fragmenty, które nie są identycznie modyfikowane w odpowiednich pozycjach. Tak różniące się grupy wymienia się oddzielnie.

> Identycznie izotopowo modyfikowane atomy lub grupy, które nie są jednak identycznie modyfikowane w równoważnych pozycjach, wymienia się odrębnie, co stanowi zmianę w porównaniu z Częścią H Zaleceń z 1979 r. (odn. 1) i rozdziałem R-8 Zaleceń z 1993 r. (odn. 2).

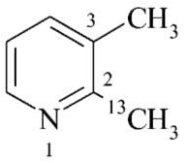
P-82.2.2.1 Różne modyfikacje izotopowe podstawników skądinąd identycznych

Kiedy dwie grupy podstawników są modyfikowane izotopowo w różny sposób tak, że nie mogą być rozpatrywane łącznie poprzez użycie określeń zwielokrotniających takich jak „di-”,”bis-”, etc., to wymienia się się je odrębnie. Preferuje się alfabetycznie podstawnik modyfikowany izotopowo w stosunku do podstawnika niemodyfikowanego.

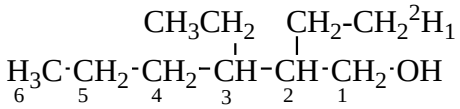
Przykłady:



N-[(7-^{131}I)jodo-6-jodo-9*H*-fluoren-2-ylo]acetamid



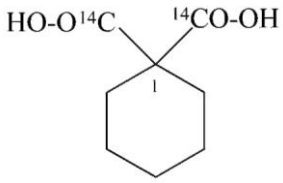
2-(^{13}C)metylo-3-metylopirydyna (PIN)
(nie 2,3-(2-^{13}C)dimetylopirydyna)



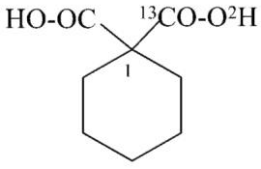
2-(2,2-$^{2}H_2$)etylo-3-etyloheksan-1-ol (PIN)

P-82.2.2.2 Kiedy dwie grupy charakterystyczne są modyfikowane izotopowo w różny sposób, tak że nie mogą być łączone poprzez użycie przedrostków zwielokrotniających takich jak „di-”, „bis-”, etc., wówczas grupa charakterystyczna modyfikowana izotopowo z większą liczbą modyfikacji jest wybierana jako główna grupa charakterystyczna wyrażana przyrostkiem, a inna grupa charakterystyczna jest wówczas wskazywana przedrostkiem. Jeśli potrzebny jest dalszy wybór, wówczas przyrostek z nuklidem o wyższej liczbie atomowej jest wybierany jako główna grupa charakterystyczna podawana w przyrostku.

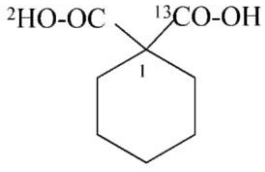
Przykłady



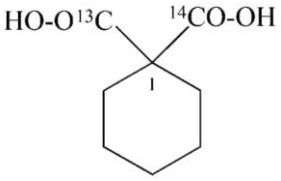
kwas cykloheksano-1,1-di(^{14}C)karboksylowy (PIN)



kwas 1-karboksycykloheksano-1-(^{13}C)karboksylowy (PIN)



kwas 1-(^{2}H)karboksycykloheksano-1-(^{13}C)karboksylowy (PIN)



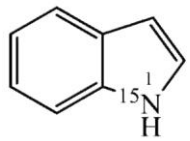
kwas 1-(^{13}C)karboksycykloheksano-1-(^{14}C)karboksylowy (PIN)

P-82.2.3 Dodawanie przedrostków hydro

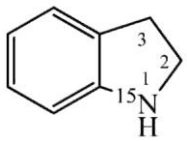
Modyfikowane izotopowo atomy wodoru, jeśli są obecne, to są zawsze związane ze szkieletem związku modyfikowanego izotopowo. Zgodnie z P-82.2.2, przedrostki hydro muszą być identyczne, zarówno w niemodyfikowanym jak i izotopowo modyfikowanym, i dodawane parami. Izotopowo modyfikowane i niemodyfikowane przedrostki hydro dodaje się jako rozłączne przedrostki podstawnikowe umieszczane przed nazwą macierzystego wodorku.

> W niniejszych zaleceniach uwodorniony układ pierścieniowy mancude jest traktowany jak to opisano w P-82.2.2, co stanowi zmianę w porównaniu z wcześniejszymi zaleceniami.

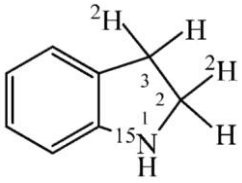
Przykłady:



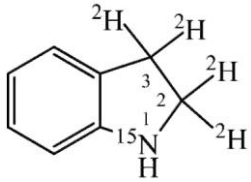
(^{15}N)-1*H*-indol (PIN)



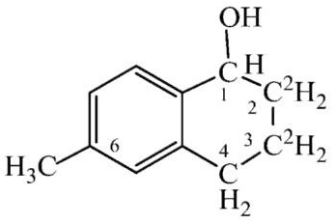
2,3-dihydro(^{15}N)-1*H*-indol (PIN)



2,3-dihydro(2,3-$^{2}H_2$,^{15}N)-1*H*-indol (PIN)



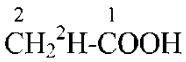
2,3-di[(^{2}H)hydro](2,3-$^{2}H_2$,^{15}N)-1*H*-indol (PIN)
[nie (2,3-$^{2}H_2$)dihydro(2,3-$^{2}H_2$,1-^{15}N)-1*H*-indol]



6-metylo-2,3-di[(^{2}H)hydro]-1,4-dihydro(2,3-$^{2}H_2$)naftalen-1-ol (PIN)
{nie 6-metylo-1,4-dihydro-2,3-di[(^{2}H)hydro](2,3-$^{2}H_2$)naftalen-1-ol;
nie 6-metylo-[(2,3-($^{2}H_2$)-1,2,3,4-tetrahydro](2,3-$^{2}H_2$) naftalen-1-ol;
te nazwy nie spełniają zalecenia P-82.2.2}

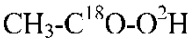
P-82.2.4 W nazwie składającej się z dwóch lub więcej wyrazów, deskryptor izotopowy umieszcza się przed odpowiednim wyrazem lub częścią wyrazu opisującą nuklid(y) chyba, że oczywiste lokanty są dostępne lub zbyteczne.

Przykłady:

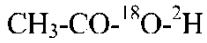


kwas (2-$^{2}H_{1}$) octowy (PIN)

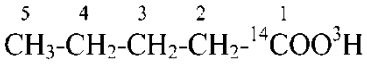
kwas (*O*-^{2}H) octowy (PIN)
(^{2}H)kwas octowy



kwas (*O*-^{2}H,^{18}O)octowy (PIN)

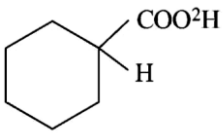


kwas (^{18}O-^{2}H) octowy (PIN)

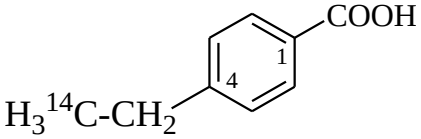


kwas (1-^{14}C)pentan(^{3}H)owy (PIN)

(^{14}C)mrówczan sodu (PIN)



kwas cykloheksano(^{2}H)karboksylowy (PIN)

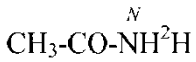


kwas 4-(2-^{14}C)etylobenzoesowy (PIN)

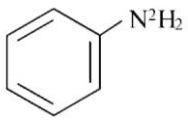
propionian (1-^{14}C)etylu (PIN)

(2-^{14}C)propionian etylu

P-82.2.5 W nazwie składającej się z jednego wyrazu, deskryptor izotopowy z odpowiednim lokantem umieszcza się przed nazwą. Tę metodę preferuje się w porównaniu z metodą umieszczającą deskryptor przed domniemaną nazwą grupy charakterystycznej.



(*N*-$^{2}H_{1}$)acetamid (PIN)
acet($^{2}H_{1}$)amid



(*N*-$^{2}H_{2}$)anilina (PIN)
(*N*-$^{2}H_{2}$)benzenoamina

P-82.3 KOLEJNOŚĆ SYMBOLI NUKLIDÓW

P-82.3.1 Kiedy izotopy różnych pierwiastków są obecne jako nuklidy w związkach podstawionych izotopowo, wówczas ich symbole szereguje się w porządku alfabetycznym, o ile znajdują się w tym samym miejscu nazwy.

Przykład:

$CH_3{}^{18}O{}^{2}H$ metan(^{2}H,^{18}O)ol (PIN)

P-82.3.2 Kiedy kilka izotopów tego samego pierwiastka występuje jako nuklidy w izotopowo podstawionym związku, wówczas ich symbole rozmieszcza się w kolejności wzrastających liczb masowych, o ile nuklidy znajdują się w tym samym miejscu w nazwie.

Przykład:

$\overset{2}{C}H_2{}^{2}H\text{-}\overset{1}{C}H{}^{3}H\text{-}OH$ (2-$^{2}H_1$,1-$^{3}H_1$)etan-1-ol (PIN)

P-82.4 PODSTAWIONE IZOTOPOWO ZWIĄZKI STEROIZOMERYCZNE

Możliwe są dwa typy związków stereoizomerycznych podstawionych izotopowo.

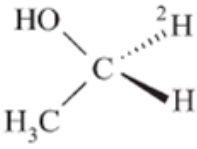
(1) takie, w których stereoizomeria wynika z modyfikacji izotopowej;

(2) takie, których niezmodyfikowane analogi same są stereoizomerami.

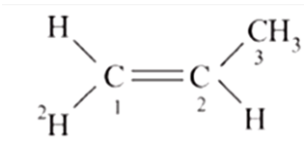
Nomenklatura związków podstawionych izotopowo wynika bezpośrednio z ogólnych metod opisanych w rozdziale P-9.

Stereodeskryptory umieszcza się w odpowiednich miejscach w nazwie stosownie do reguł stereochemicznych. Kiedy stereodeskryptory muszą być wstawione w nazwę w to samo miejsce co deskryptory izotopowe, jako pierwsze wymienia się stereodeskryptory.

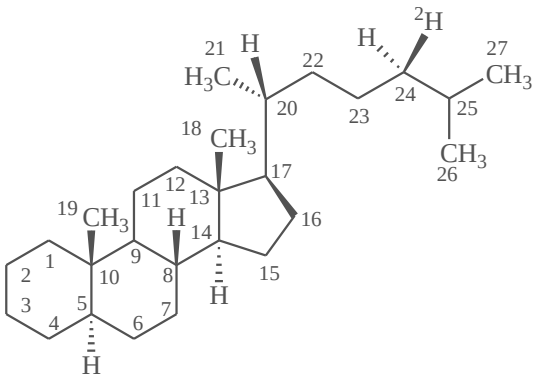
P-82.4.1 Przykłady, w których stereoizomeria jest wynikiem podstawienia izotopowego



(1*R*)-(1-$^{2}H_1$)etanol (PIN)



(1*E*)-(1-$^{2}H_1$)prop-1-en (PIN)

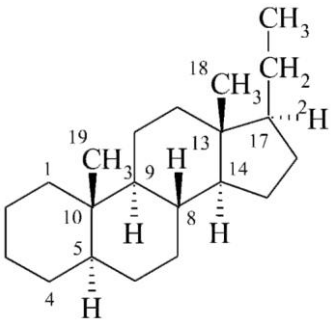


(24*R*)-5α-$^{2}H_1$)cholestan

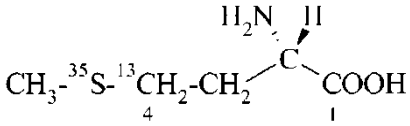
P-82.4.2 Przykłady stereoizomerów podstawionych izotopowo

Afiksy stereochemiczne (np. D i L) dodaje się zgodnie z regułami odpowiednich klas, takich jak węglowodany, aminokwasy, steroidy, etc., opisanych w P-10; zwykle odnoszą się one do związku macierzystego (lub związku niezmodyfikowanego) zgodnie z daną klasą związków. W tych klasach deskryptory izotopowe mogą występować za deskryptorami stereochemicznymi, zgodnie ze zwyczajami biochemicznymi (odn. 30).

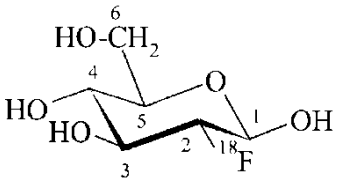
Przykłady:



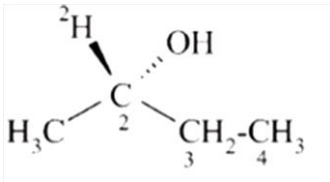
5α-(17-$^{2}H_{1}$)pregnan



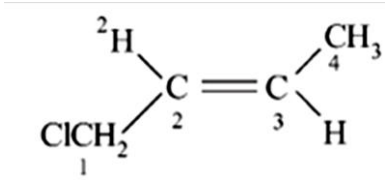
1-(4-^{13}C,^{35}S)metionina



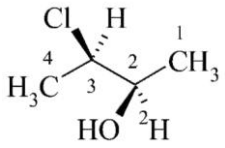
2-deoksy-2-(^{18}F)fluoro-β-D-glukopiranoza



(2*S*)-(2-$^{2}H_{1}$)butan-2-ol (PIN)



(2*E*)-1-chloro(2-$^{2}H_{1}$)but-2-en (PIN)



(2*R*,3*R*)-3-chloro(2-$^{2}H_{1}$)butan-2-ol (PIN)

P-82.5 NUMEROWANIE

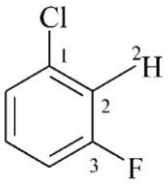
P-82.5.1 Numeracja w porównaniu ze związkami niemodyfikowanymi

Numeracja związku modyfikowanego izotopowo nie zmienia się w porównaniu ze związkiem niemodyfikowanym. Pośród cech strukturalnych związku, które należy rozważać kolejno, w

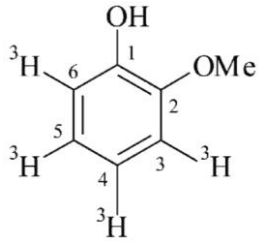
numeracji, jak podano w P-14.4, obecność nuklidów rozważa się na końcu, z wyjątkiem chiralności wynikającej z podstawienia izotopowego.

Przykłady:

$^{1}CF_3\text{-}^{2}CH_2{}^{2}H$ 1,1,1-trifluoro(2-$^{2}H_1$)etan (PIN)



1-chloro-3-fluoro(2-$^{2}H_1$)benzen (PIN)



2-metoksy(3,4,5,6-$^{3}H_4$)fenol (PIN)

P-82.5.2 Pierwszeństwo pomiędzy izotopowo podstawionymi i niepodstawionymi atomami lub grupami

Kiedy istnieje wybór pomiędzy równoważnymi numeracjami w związku niemodyfikowanym izotopowo, wówczas początek i kierunek numeracji analogów związku podstawionego izotopowo wybiera się tak, by przypisać najniższe lokanty modyfikowanym atomom lub grupom rozważanym razem w jednej serii, w kolejności wzrastających numerów. Jeśli dalej pozostaje wybór, to pierwszeństwo najniższego lokantu przysługuje nuklidowi z wyższą liczbą atomową. W przypadku różnych nuklidów tego samego pierwiastka pierwszeństwo przysługuje nuklidom o wyższej liczbie masowej.

Przykłady:

$^{1}CH_3\text{-}^{14}{}^{2}CH_2\text{-}^{3}CH_2\text{-}^{4}CH_3$

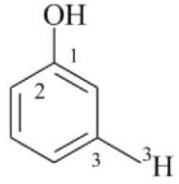
(2-^{14}C)butan (PIN)
[nie (3-^{14}C)butan]

$^{1}CH_3\text{-}^{2}C^{2}H_2\text{-}^{14}{}^{3}CH_2\text{-}^{4}CH_3$

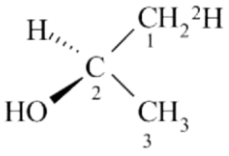
(3-^{14}C,2,2-$^{2}H_2$)butan (PIN)
[nie (2-^{14}C,3,3-$^{2}H_2$)butan]

$^{1}CH_3\text{-}^{14}{}^{2}CH_2\text{-}^{3}CH^{2}H\text{-}^{4}CH_3$

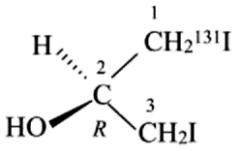
(2-^{14}C,3-$^{2}H_1$)butan (PIN)
[nie (3-^{14}C,2-$^{2}H_1$)butan]



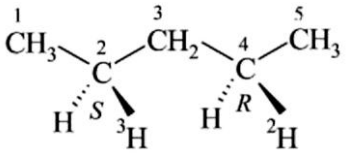
(3-^{3}H)fenol (PIN)



(2*R*)-(1-$^{2}H_1$)propan-2-ol (PIN)



(2*R*)-(1-^{131}I)jodo-3-jodopropan-2-ol (PIN)



(2*S*,4*R*)-(4-$^{2}H_1$,2-$^{3}H_1$)pentan (PIN)

P-82.6 LOKANTY

P-82.6.1 Pominięcie lokantów (patrz także P-14.3.4)

P-82.6.1.1 W preferowanych nazwach IUPAC pomija się lokanty wówczas, kiedy nie są one niezbędne w niezmodyfikowanych nazwach. Jednakże, jeśli modyfikacja izotopowa wymaga lokantów wskazujących jej pozycję, wówczas muszą być podane wszystkie lokanty i żaden nie może być pominięty.

Przykłady:

C^2H_3-CN ($^2H_3$)acetonitryl (PIN)
(tak jak w trichloroacetonitrylu)

CH_3-CH_2-O^{2}H etan(^{2}H)ol (PIN)
(jak w etanolu)

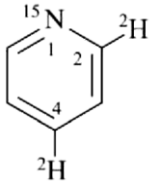
$^{13}CH_3$-CH_2-OH (2-^{13}C)etan-1-ol
[nie (2-^{13}C)etanol]

$CH_2{}^2H$-O-C^2H_2-S-CH_2-OOH

{[($^2H_1$)metoksy($^2H_2$)metylo]sulfanylo}metanoperoksol (PIN)

P-82.6.1.2 Lokanty opuszcza się wówczas, gdy jest tylko jeden atom danego pierwiastka.

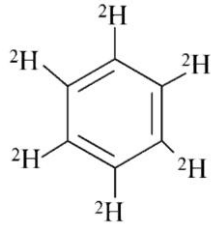
Przykład:



(2,4-$^{2}H_2$,^{15}N)pirydyna (PIN)

P-82.6.1.3 Lokanty pomija się w związkach lub grupach podstawników, w których wszystkie pozycje są całkowicie izotopowo podstawione lub zmodyfikowane w ten sam sposób.

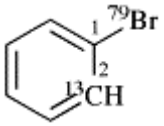
Przykład:



($^2H_6$)benzen (PIN)

P-82.6.1.4 Lokantów **nie** pomija się, gdy możliwe są izomery.

Przykład:

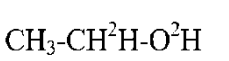


(1-^{79}Br)bromo(2-^{13}C)benzen (PIN)

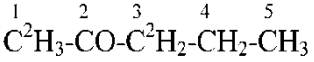
P-82.6.2 Literowe i/lub liczbowe lokanty

Kiedy lokanty są potrzebne dla określenia struktury macierzystej lub jej fragmentu, zdefiniowanego za pomocą nawiasów, wówczas należy podać wszystkie lokanty dla struktury macierzystej lub tego fragmentu. Właściwe pozycje nuklidów muszą być wskazane w deskryptorach izotopowych odpowiednimi lokantami, litery i/lub liczby, poprzedzające symbol(e) nuklidu(ów). W preferowanych nazwach wszystkie lokanty umieszcza się przed symbolem multiplikowanego nuklidu.

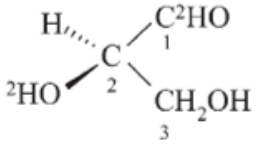
Przykłady:



(1-$^2H_1$)etan-1-(^{2}H)ol (PIN)



(1,1,1,3,3-$^2H_5$)pentan-2-on (PIN)

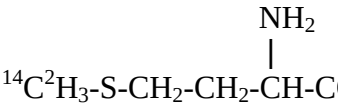


(2*R*)-2-(^{2}H)hydroksy-3-hydroksy(1-^{2}H)propanal (PIN)
D-(*O*^{2}-^{2}H)glicero(^{2}H)aldehyd
aldehyd D-(2-*O*,1-$^2H_2$)glicerynowy

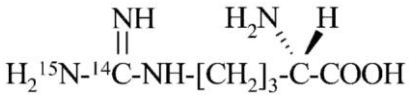
P-82.6.3 Wskazywanie lokantami nuklidów w pozycjach, których normalnie nie określa się lokantami

P-82.6.3.1 Kiedy nuklid zajmuje nie numerowaną pozycję, wówczas do wskazania jego pozycji można użyć przedrostka pisanego kursywą lub greckiej litery.

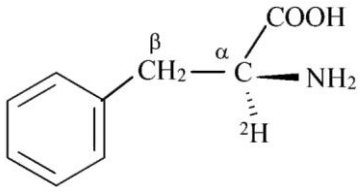
Przykłady:



D,L-*metylo*-(^{14}C,^{2}H$_3$)metionina



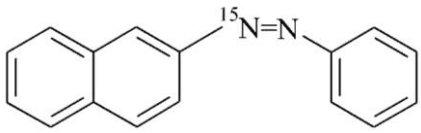
L-(*karboamidoilo*-^{14}C,*N*′-^{15}N)arginina
L-(*amidyno*-^{14}C,*N*′-^{15}N)arginina
L-(*guanidyno*-^{14}C,*N*′-^{15}N)arginina
(patrz reguła H-4.2.1 odn.1)



L-(α-^{2}H)fenyloalanina

P-82.6.3.2 Jeśli nuklid zajmuje nie numerowaną pozycję, lub kiedy jego pozycja nie może być łatwo zdefiniowana zgodnie z **P-82.6.3.1**, wówczas symbol nuklidu jest włączany do symbolu całej grupy, wskutek czego jest połączony z głównym fragmentem struktury. Reguła ta jest użyteczna w nomenklaturze ogólnej, w której wiele nazw konstruuje się bez lokantów.

Przykłady:



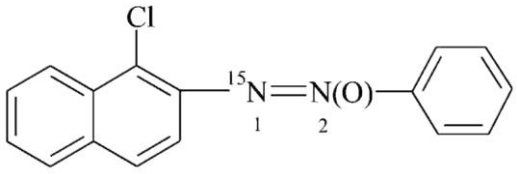
1-(naftalen-2-ylo)-2-fenylo(1-^{15}N)diazen (PIN)
naftaleno-2-(^{15}N=N)azobenzen

CH$_3$-CH$_2$-CH=^{15}N-NH$_2$oksyd

1-propylideno(1-^{15}N)hydrazyna (PIN)
(^{15}N-NH$_2$)hydrazon propanalu

CH$_3$-CH$_2$-S-^{34}S-S-$\overset{3}{\text{C}}$H$_2$-$\overset{2}{\text{C}}$H$_2$-$\overset{1}{\text{C}}$OOH

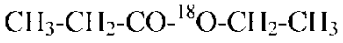
kwas 3-[etylo(2-^{34}S)trisulfanylo]propanowy (PIN)
kwas 3-[etylo(S-^{34}S-S)tritio]propionowy [patrz Reguła H-4.2.2, (1)]



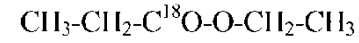
2-oksyd 1-(1-chloronaftalen-2-ylo)-2-fenylo(1-^{15}N)diazenu
1-chloro-2-(fenylo-*ON*^{15}N-azoksy)naftalen

P-82.6.4 Pisane kursywą symbole nuklidów i/lub pisane kursywą wielkie litery, stosuje się dla odróżnienia różnych nuklidów tego samego pierwiastka.

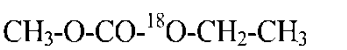
Przykłady:



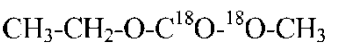
propan($^{18}O_1$)ian ^{18}*O*-etylu (PIN)



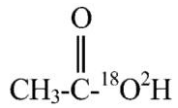
propan($^{18}O_1$)ian *O*-etylu (PIN)



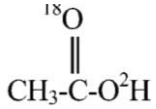
($^{18}O_1$)karbonian ^{18}*O*-etylu-*O*-metylu (PIN)



($^{18}O_2$)karbonian *O*-etylu-^{18}*O*-metylu (PIN)



kwas (^{18}*O*-^{2}H)octowy
(‘^{18}*O*’ jest tu zarówno deskryptorem izotopowym jak i lokantem)



kwas (^{18}O,*O*-^{2}H)octowy
(‘^{18}O’ jest deskryptorem izotopowym, a ‘*O*’ jest lokantem)

P-83 ZWIĄZKI IZOTOPOWO ZNACZONE

Związek znaczony izotopowo jest mieszaniną związku niezmodyfikowanego z jednym lub więcej analogów związku(ów) podstawionych izotopowo.

Chociaż związek znaczony izotopowo jest w istocie mieszaniną, jeśli chodzi o skład chemiczny (taki sam jak w związku niezmodyfikowanym), to jednak dla potrzeb nomenklatury, takie mieszaniny są nazywane „izotopowo znaczonymi” związkami.

P-83.1 Związki specyficznie znaczone
P-83.2 Związki selektywnie znaczone
P-83.3 Związki nieselektywnie znaczone
P-83.4 Związki izotopowo zubożone
P-83.5 Znakowanie ogólne i równomierne

P-83.1 ZWIĄZKI SPECYFICZNIE ZNACZONE

Izotopowo znaczony związek jest uważany za ‘specyficznie znaczony’ wówczas, kiedy związek podstawiony izotopowo, jest formalnie dodany do związku będącego jego niemodyfikowanym izotopowo analogiem. W takim przypadku, definiuje się zarówno pozycję(e) jak i liczbę nuklidów.

Struktury (patrz P-83.1.1) są identyczne z tymi podanymi w P-82 dla związków podstawionych izotopowo, z wyjątkiem nawiasów zawierających symbol nuklidu.

Przykłady:

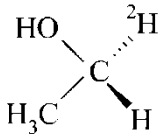
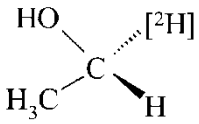
Związek podstawiony izotopowo	dodany do	izotopowo niezmodyfikowanego związku	prowadzi do utworzenia	związku specyficznie znaczonego
$^{13}CH_4$		CH_4		$[^{13}C]H_4$
$CH_2{}^2H_2$		CH_4		$CH_2[^2H_2]$

P.83.1.1 Wzory specyficznie znaczonych związków

Wzór strukturalny związku specyficznie znaczonego zapisuje się w zwykły sposób, lecz z symbolem(ami) odpowiednich nuklidów i z zwielokrotniającym dolnym indeksem podanymi w nawiasie kwadratowym, [ ]. Wzór strukturalny zapisuje się w ten sam sposób jak wzór związku podstawionego izotopowo.

Chociaż wzór związku specyficznie znaczonego nie odpowiada składowi całego materiału, który zwykle składa się w większości ze związku izotopowo niezmodyfikowanego, to jednak wskazuje obecność ważnego składnika, jakim jest związek podstawiony izotopowo.

Przykłady:

Wzory związków podstawionych izotopowo	Wzory związków specyficznie znaczonych izotopowo
CH_3-CO-NH^2H	CH_3-CO-NH[^{2}H]
	
C^2H_3-CO-C^2H_2-CH_2-CH_3	C[$^3H_3$]-CO-C[$^2H_2$]-CH_2-CH_3

Specyficznie znaczony izotopowo związek jest:

(a) pojedynczo znaczony wówczas, gdy związek podstawiony izotopowo ma tylko jeden atom zmodyfikowany izotopowo;

Przykład:

CH_3-CH[^{2}H]-OH

(b) wielokrotnie znaczony wówczas, gdy związek podstawiony izotopowo ma więcej niż jeden zmodyfikowany atom tego samego pierwiastka w tej samej lub w różnych pozycjach;

Przykłady:

CH_3-C[$^2H_2$]-OH

CH_2[^{2}H]-CH[^{2}H]-OH

(c) znaczenie w sposób mieszany wówczas, gdy związek podstawiony izotopowo ma więcej niż jeden rodzaj zmodyfikowanych atomów;

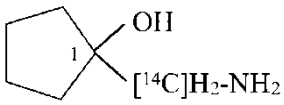
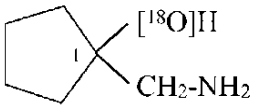
Przykład:

CH_3-CH_2-[^{18}O][^{2}H]

P-83.1.2 Nazwy związków specyficznie znaczonych

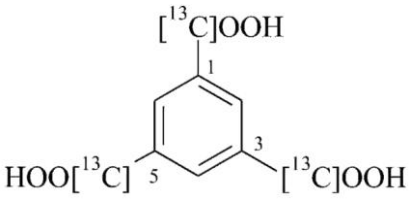
P-83.1.2.1 Nazwę związku specyficznie znaczonego tworzy się dodając lub wstawiając w nawias kwadratowy, [ ], symbolu(i) nuklidu(ów) poprzedzonego(ych) niezbędnymi lokantami, przed określeniem fragmentu związku zmodyfikowanrgo izotopowo. Kiedy możliwe jest znaczenie wielokrotne, wówczas liczba atomów, które zostały znaczone musi być wyszczególniona poprzez indeks dolny symbolu atomu, nawet wtedy, gdy znaczony jest tylko jeden atom. Jest to niezbędne z uwagi na rozróżnienie pomiędzy specyficznie i selektywnie lub nieselektywnie znaczonym związkiem.

Przykłady:

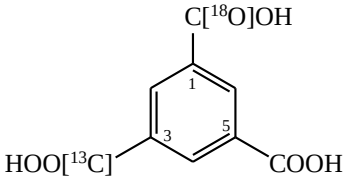
[^{13}C]H_4	CH_3[^{2}H]
[^{13}C]metan (PIN)	[$^{2}H_1$]metan (PIN)
C[$^{2}H_2$]Cl_2	dichloro[$^{2}H_2$]metan (PIN)
	1-(amino[^{14}C]metylo)cyklopentan-1-ol (PIN)
	1-(aminometylo)cyklopentan-1-[^{18}O]ol (PIN)

P-83.1.2.2 Wszystkie reguły podane w P-82 mówiące o tym, jak budować nazwę związku podstawionego izotopowo, można stosować w budowie nazw związków specyficznie znaczonych, z wyjątkiem tego, że deskryptor izotopowy umieszcza się w nawiasie kwadratowym, a nawias okrągły obejmuje kompleksowe przedrostki. Na przykład geminalne kwasy dikarboksylowe, patrz P-82.2.2.2.

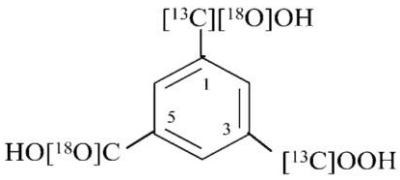
Przykłady:



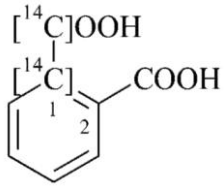
kwas benzeno-1,3-5-tri([^{13}C]karboksylowy) (PIN)



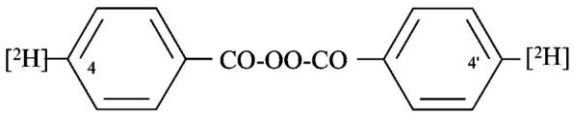
kwas 3-[^{13}C]karboksy-5-karboksybenzeno-1-[^{18}O]karboksylowy (PIN)



kwas 3-[^{13}C]karboksy-5-[^{18}O]karboksybenzeno-1-[^{13}C,^{18}O]karboksylowy (PIN)
(nie kwas 1,3,5-[1,5-$^{13}C_2$,1,3-$^{18}O_2$]trikarboksylowy)

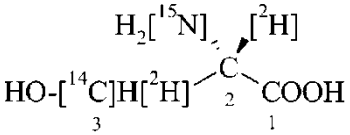


kwas 2-karboksy[1-^{14}C]benzeno-1-[^{14}C]karboksylowy (PIN)
(nie kwas [1-^{14}C]benzeno-1,2-[1-^{14}C]dikarboksylowy)
[1-^{14}C]kwas [1-^{14}C]ftalowy

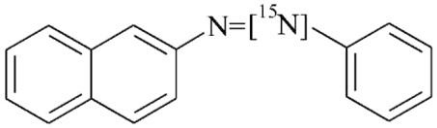


peroksyanhydryd [4-^{2}H]benzoesowy (PIN)
peroksyd di([4-^{2}H]benzoilu)

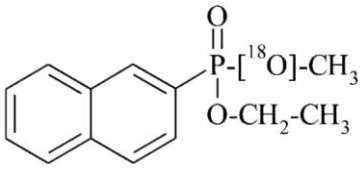
CH_3-[^{14}C]OOH kwas [1-^{14}C]octowy (PIN; patrz P-82.2.4)



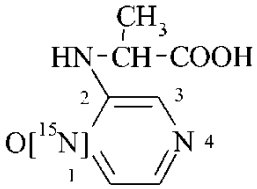
L-[3-^{14}C,2,3-$^{2}H_2$,^{15}N]seryna (patrz P-82.42)
kwas 2-[^{15}N]amino-3-hydroksy-[2,3-$^{2}H_2$,3-^{14}C]propanowy



2-(naftalen-2-ylo)-1-fenylo[1-^{15}N]diazen (PIN)
naftaleno-2-[N=^{15}N]azobenzen (patrz p-82.6.3.2)



naftalen-2-ylo[^{18}O]fosfonian *O*-etylu-^{18}*O*-metylu (PIN)



1-oksyd 2-[(1-karboksyetylo)amino][1-^{15}N]pirazyny
^{15}*N*-oksyd *N*-([1-^{15}N]pirazyn-2-ylo)alaniny (patrz P-82.6.4)

P-83.2 ZWIĄZKI SELEKTYWNIE ZNACZONE

Związek znaczony izotopowo jest uznawany jako znaczony selektywnie wówczas, gdy mieszanina związków podstawionych izotopowo jest formalnie dodana do analogu niezmodyfikowanego w taki sposób, że pozycja(e), choć niekoniecznie numeracja, każdego znaczonego nuklidu jest zdefiniowana. Związek selektywnie znaczony może być uważany za mieszaninę związków specyficznie znaczonych. Selektywnie znaczonym związkiem może być :

(a) wielokrotnie znaczony, jeśli w niezmodyfikowanym związku jest więcej niż jeden atom tego samego pierwiastka w pozycji gdzie następuje modyfikacja izotopowa, np. H, w CH_4; lub gdzie jest wiele atomów tego samego pierwiastka w różnych pozycjach, w których następuje modyfikacja izotopowa, np. C, w C_4H_8O).

(b) znaczony w sposób mieszany, o ile jest w nim więcej niż jeden znaczony nuklid, np. C i O w CH_3-CH_2-OH.

Kiedy w związku jest tylko jeden atom pierwiastka, który może być zmodyfikowany izotopowo, wówczas może to być jedynie znakowanie specyficzne.

P-83.2.1 Wzory związków znaczonych selektywnie

P-83.2.1.1 Selektywnie znaczonego związku nie można opisać unikalnym wzorem strukturalnym; a więc przedstawia się go poprzez wstawienie symbolu(i) nuklidu(ów) poprzedzonym(ch) niezbędnym(i) lokantem(ami) (literami i/lub cyframi), lecz bez dolnych indeksów zwielokrotniających, zamkniętym w nawiasie kwadratowym, [ ], bezpośrednio przed zwykłym wzorem lub, jeśli jest to konieczne, przed częścią wzoru, która ma niezależną numerację. Nie

powtarza się identycznych lokantów. Kiedy obecne są różne nuklidy, wówczas symbole nuklidów wpisuje się w porządku alfabetycznym wynikającym z ich symboli, lub jeśli symbole atomów są identyczne, wpisuje je w kolejności wzrastających mas atomowych.

Przykłady:

mieszanina związków podstawionych izotopowo	dodana do	związku izotopowo niemodyfikowanego	daje związki selektywnie znaczone
CH_3H,$CH_2{}^2H_2$ CH^2H_3,C^2H_4 lub każde dwa lub więcej z powyższych		CH_4	$[^2H]CH_4$
$\overset{4}{C}H_3\text{-}\overset{3}{C}H_2\text{-}\overset{2}{C}H^2H\text{-}\overset{1}{C}OOH$ $\overset{4}{C}H_3\text{-}\overset{3}{C}H_2\text{-}\overset{2}{C}{}^2H_2\text{-}\overset{1}{C}OOH$		$CH_3\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}COOH$	$[2\text{-}^2H]\overset{4}{C}H_3\text{-}\overset{3}{C}H_2\text{-}\overset{2}{C}H_2\text{-}\overset{1}{C}OOH$
$\overset{4}{C}H_3\text{-}\overset{3}{C}{}^{14}H_2\text{-}\overset{2}{C}{}^{14}H_2\text{-}\overset{1}{C}OOH$ $\overset{4}{C}H_3\text{-}\overset{3}{C}{}^{14}H_2\text{-}\overset{\mathbf{2}}{C}H_2\text{-}\overset{\mathbf{1}}{C}OOH$ $\overset{4}{C}H_3\text{-}\overset{3}{C}H_2\text{-}\overset{\mathbf{2}}{C}{}^{14}H_2\text{-}\overset{\mathbf{1}}{C}OOH$ lub dowolne dwa powyższych		$CH_3\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}COOH$	$[2,3\text{-}^{14}\overset{4}{C}]\overset{3}{C}H_3\text{-}\overset{2}{C}H_2\text{-}\overset{1}{C}H_2\text{-}COOH$
$\overset{2}{C}H_3\text{-}\overset{1}{C}{}^{14}H_2\text{-}OH$ $\overset{2}{C}H_3\text{-}\overset{1}{C}H_2\text{-}^{18}OH$ $\overset{2}{C}H_3\text{-}\overset{1}{C}{}^{14}H_2\text{-}^{18}OH$ lub dowolne dwa z powyższych		$CH_3\text{-}CH_2\text{-}OH$	$[1\text{-}^{14}C,^{18}O]\overset{2}{C}H_3\text{-}\overset{1}{C}H_2\text{-}OH$
$^{14}\overset{3}{C}H_3\text{-}\overset{2}{C}H_2\text{-}\overset{1}{C}OO\text{-}CH_3$ $^{14}\overset{3}{C}H_3\text{-}\overset{2}{C}H_2\text{-}\overset{1}{C}OO\text{-}^{14}CH_3$ $\overset{3}{C}H_3\text{-}\overset{2}{C}H_2\text{-}\overset{1}{C}OO\text{-}^{14}CH_3$ lub dowolne dwa z powyższych		$CH_3\text{-}CH_2\text{-}COO\text{-}CH_3$	$[3\text{-}^{14}C]CH_3\text{-}CH_2\text{-}COO^{-}[^{14}C]CH_3$

P-83.2.1.2 W związkach selektywnie znaczonych utworzonych poprzez zmieszanie kilku znanych związków podstawionych izotopowo z analogami izotopowo niezmodyfikowanymi, liczba lub możliwa liczba znaczonego(ych) nuklidu(ów) w każdej pozycji może być wskazana indeksami dolnymi symboli atomów. Dwa lub więcej indeksów odnoszących się do tego samego nuklidu oddziela się średnikami. W związku wielokrotnie znaczonym lub znaczonym w sposób mieszany, indeksy dolne wpisuje się sukcesywnie w takiej samej kolejności, jak rozpatrywane są związki różnie izotopowo podstawione. Indeks dolny zero stosuje się po to, by wskazać, że jeden z związków podstawionych izotopowo nie jest zmodyfikowany we wskazanej pozycji.

Przykłady:

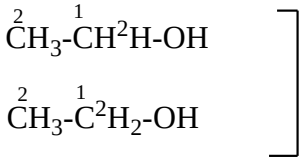
Mieszanina związków podstawionych izotopowo	dodana do	związku izotopowo niezmodyfi-kowanego	tworzy	związek znaczoany selektywnie
$\left.\begin{array}{l}{}^{2}CH_2{}^{2}H\text{-}{}^{1}CH_2\text{-}OH \\ {}^{2}CH{}^{2}H_2\text{-}{}^{1}CH_2\text{-}OH\end{array}\right]$		$CH_3\text{-}CH_2\text{-}OH$		$[2\text{-}H_{1;2}]{}^{2}CH_3\text{-}{}^{1}CH_2\text{-}OH$
$\left.\begin{array}{l}{}^{2}CH{}^{2}H_2\text{-}{}^{1}CH_2\text{-}OH \\ {}^{2}CH{}^{2}H_2\text{-}{}^{1}CH_2\text{-}{}^{18}OH\end{array}\right]$		$CH_3\text{-}CH_2\text{-}OH$		$[2\text{-}H_2;2,{}^{18}O_{0;1}]{}^{2}CH_3\text{-}{}^{1}CH_2\text{-}OH$

P-83.2.2 Nazwy związków znaczonych selektywnie

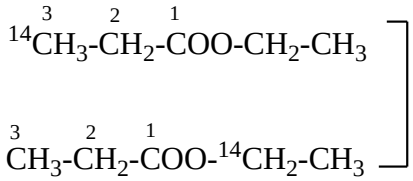
Nazwę związku znaczonego selektywnie tworzy się w ten sam sposób jak nazwę związku znaczonego specyficznie z tym, że zazwyczaj pomija się indeksy zwielokrotniające po symbolach atomów. Nie powtarza się identycznych lokantów odpowiadających tym samym pierwiastkom. Nazwa związku selektywnie znaczonego różni się od nazwy odpowiedniego związku podstawionego izotopowo użyciem, zamiast okrągłego nawiasu, nawiasów kwadratowych [ ], obejmujących deskryptor nuklidu, oraz pominięciem powtórzeń identycznych lokantów i zwielokrotniających indeksów dolnych.

Przykłady:

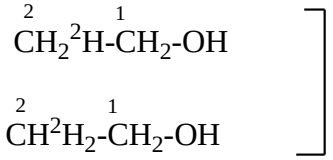
Mieszanina związków podstawionych izotopowo	dodana do	jest nazywana
$\left.\begin{array}{l}CH_3{}^{2}H,\ CH_2{}^{2}H_2 \\ CH{}^{2}H_3,\ C_2H_4\end{array}\right]$	CH_4	[^{2}H]metan (PIN) (nie [$^{2}H_4$]metan)



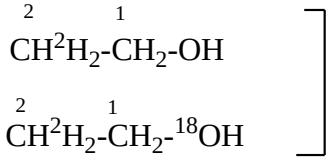
$CH_3\text{-}CH_2\text{-}OH$ [1-^{2}H]etan-1-ol (PIN)
(nie [1,1-$^{2}H_2$]etan-1-ol)



$CH_3\text{-}CH_2\text{-}COO\text{-}CH_2\text{-}CH_3$ [3-^{14}C]propanian [1-^{14}C]etylu



$CH_3\text{-}CH_2\text{-}OH$ [2-$_2H_{1;2}$]etanol (PIN)



$CH_3\text{-}CH_2\text{-}OH$ [2-$^{2}H_{2;2}$]etan[$^{18}O_{0;1}$]ol

---

P-83.3 ZWIĄZKI NIESELEKTYWNIE ZNACZONE

P.83.3.1 Związek znaczony izotopowo jest uważany za znaczony nieselektywnie wówczas, gdy zarówno pozycja(e) jak i liczba znaczonych nuklidów nie są zdefiniowane.

Kiedy w tej samej pozycji znajdują się tylko atomy pierwiastka podlegającego modyfikacji w związku, wynikiem jest znakowanie specyficzne lub selektywne. Nieselektywne znakowanie wymaga by pierwiastek, który podlega modyfikacji, znajdował się w różnych pozycjach struktury. Przykładowo, CH_4 i $CCl_3\text{-}CH_2\text{-}CCl_3$ mogą być znakowane izotopem wodoru jedynie specyficznie lub selektywnie.

P-83.3.2 Wzory

Znakowanie nieselektywne jest pokazane we wzorze poprzez wstawienie symbolu nuklidu, w nawiasie kwadratowym, bezpośrednio przed wzorem liniowym bez lokantów i indeksów dolnych.

Przykład:

[^{13}C]$CH_3\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}COOH$

P-83.3.3 Nazwy

Nazwę nieselektywnie znaczonego izotopowo związku tworzy się w ten sam sposób, jak nazwę związku znaczonego selektywnie, lecz nie zawiera ona ani lokantów ani indeksów dolnych w deskryptorze nuklidu.

Przykłady:

chloro[^{2}H]benzen (PIN)
[^{13}C]propan-1,2,3-triol (PIN)
[^{13}C]glicerol

P-83.4 ZWIĄZKI IZOTOPOWO DEFICYTOWE

P-83.4.1 Związek znaczony izotopowo może być określony jako izotopowo deficytowy wówczas, gdy zawartość izotopu jednego lub więcej pierwiastków jest zubożona, np. gdy jednego lub więcej nuklidów jest mniej niż w składzie naturalnym.

P-83.4.2 Wzory

Deficyt izotopu jest wskazywany we wzorze poprzez dodanie kursywą symbolu '*def*', bez łącznika, bezpośrednio przed symbolem odpowiedniego nuklidu.

Przykład:

[*def*^{13}C]$CHCl_3$

P-83.4.3 Nazwy

Nazwę związku izotopowo deficytowego tworzy się poprzez dodanie kursywą symbolu '*def*', bez łącznika, bezpośrednio poprzedzającego symbol odpowiedniego nuklidu; oba zamknięte są w nawiasie kwadratowym i wymieniane przed nazwą lub fragmentem nazwy, która jest izotopowo modyfikowana.

Przykład:

trichloro[*def*^{13}C]metan (PIN)
[*def*^{13}C]chloroform

P-83.5 ZNAKOWANIE OGÓLNE I RÓWNOMIERNE

P.83.5.1 W nazwie związku selektywnie znaczonego, w którym wszystkie pozycje wskazanego pierwiastka są znaczone, choć niekoniecznie w tej samej proporcji, w miejsce lokantów stosuje się symbol 'G', aby wskazać znakowanie 'ogólne'.

Przykłady:

Związki podstawione izotopowo	**dodane do**	**określamy jako**
1. mieszanina podstawionych związków (znakowanie selektywne)		

CH_3-CH_2-CH_2-^{14}COOH
CH_3-CH_2-^{14}CH_2-COOH
CH_3-^{14}CH_2-CH_2-COOH
$^{14}CH_3$-CH_2-CH_2-^{14}COOH
etc.

CH_3-CH_2-CH_2-COOH kwas[G-^{14}C]butanowy

2. D-Glukoza, w której wszystkie sześć pozycji jest znakowanych ^{13}C, lecz niekoniecznie równomiernie, jest określana jako
D-[G-^{14}C]glukoza

P-83.5.2 W nazwie związku selektywnie znaczonego, w którym wszystkie pozycje wskazanego pierwiastka są znakowane w tych samych proporcjach izotopów, stosuje się symbol „U" zamiast lokantów, aby wskazać 'równomierne' znakowanie.

Przykłady:

Związki podstawione izotopowo	**dodane do**	**określamy jako**
1. Mieszanina związków podstawionych (znakowanych równomiernie) CH_3-CH_2-CH_2-^{14}COOH CH_3-CH_2-^{14}CH_2-COOH CH_3-^{14}CH_2-CH_2-COOH $^{14}CH_3$-CH_2-CH_2-COOH w równych ilościach	CH_3-CH_2-CH_2-COOH	kwas [U-^{14}C]butanowy
2. D-Glukoza, w której nuklid ^{14}C jest równomiernie rozprowadzony w sześciu pozycjach jest określana jako D-[U-^{14}C]glukoza		

Uwaga: W przypadku nuklidów radioaktywnych, wyrażenie 'takie same proporcje' znaczy też 'taka sama radioaktywność'.

P-83.5.3 W nazwie związku selektywnie znaczonego, symbol 'U' (patrz P-83.5.2) umieszczony przed odpowiednimi lokantami stosuje się podobnie, by wskazać znakowanie w tych samych proporcjach w określonych pozycjach.

Przykład:

D-glukoza, w której nuklid ^{14}C jest równomiernie rozprowadzony pomiędzy pozycje 1,3 i 5 jest określana jako D-[U-1,3,5-^{14}C]glukoza

P-84 PORÓWNAWCZE PRZYKŁADY WZORÓW I NAZW ZWIĄZKÓW MODYFIKOWANYCH IZOTOPOWO

Rodzaje związków	**Wzory**	Nazwy
niezmodyfikowany	$CH_3\text{-}CH_2\text{-}OH$	etanol
podstawiony izotopowo	$C^2H_3\text{-}^1CH_2\text{-}O^2H$	**(**2,2,2-$^2H_3$)etan-1-(^{2}H)ol (PIN) (*O*,2,2,2-$^2H_4$)-etan-1-ol
znaczony specyficznie	$^2C[^2H_3]\text{-}^1CH_2\text{-}O[^2H]$	**[**2,2,2-$^2H_3$]etan-1-[^{2}H]ol (PIN) [*O*,2,2,2-$^2H_4$]-etan-1-ol
znaczony selektywnie	$[O,2\text{-}^2H]^2CH_3\text{-}^1CH_2\text{-}OH$	[2-^{2}H]etan-1-[^{2}H]ol
	$[2\text{-}^2H_{2;2},{}^{18}O_{0;1}]^2CH_3\text{-}^1CH_2\text{-}OH$	[2-$^2H_{2;2}$]etan-1-[$^{18}O_{0;1}$]ol
znaczony nieselektywnie	$[^2H]CH_3\text{-}CH_2\text{-}OH$	[2H]etan-1-ol
izotopowo deficytowy	[*def*^{13}C]$CH_3\text{-}CH_2\text{-}OH$	**[***def*^{13}C]etanol

ROZDZIAŁ P-9 OKREŚLANIE KONFIGURACJI I KONFORMACJI

P-90 Wprowadzenie
P-91 Graficzne przedstawianie i nazywanie stereoizomerów
P-92 System pierwszeństwa Cahna-Ingolda-Preloga (CIP) i reguły sekwencji
P-93 Określanie konfiguracji
P-94 Konformacja i deskryptory konformacyjne

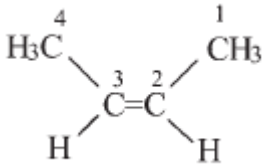
P-90 WPROWADZENIE

Ten rozdział dotyczy jedynie głównych zasad określania konfiguracji i konformacji związków organicznych. W nomenklaturze systematycznej struktura związku organicznego jest opisywana jednym lub kilkoma afiksami dodanymi do nazwy, która sama w sobie nie opisuje stereochemicznej konfiguracji lub konformacji. Afiksy te określa się ogólnym mianem stereodeskryptorów. Tak więc stereoizomery, takie jak enancjomery, różnią się w nazwie jedynie użytym stereodeskryptorem. W przeciwieństwie do tego izomery '*cis-trans'* mogłyby mieć różne nazwy ze względu na różne stereodeskryptory lub też nazwy uzależnione od użytego systemu nomenklatury. Także niektóre zachowane nazwy zwyczajowe zawierają w sobie własny opis stereochemiczny, np. kwas maleinowy, cholesterol i inne związki opisane w rozdziale P-10.

Celem uzyskania jednoznacznego opisu stereoizomerów Cahn, Ingold i Prolog (odn. 34, 35) zaproponowali porządek starszeństwa dla ligandów (atomów i grup) przyłączonych do atomu węgla lub innych atomów, określany zwyczajowo jako 'system priorytetu (pierwszeństwa) CIP'. Priorytet ustala się przy użyciu 'reguł sekwencji'. Reguły te omawiane są w P-92. Następnie opisane jest ich zastosowanie do jednostek stereogenicznych, głównie – do najbardziej typowych związków spotykanych w chemii organicznej. Związki otrzymywane syntetycznie omawiane są w P-93, zaś związki naturalne – w rozdziale P-10.

W przypadku, gdy do opisu izomerów *cis-trans*, diastereoizomerów lub enancjomerów możliwe jest użycie różnych stereodeskryptorów, jeden z nich zaleca się jako preferowany. Ten preferowany stereodeskryptor wykorzystuje się przy tworzeniu preferowanej nazwy IUPAC (PIN). W nomenklaturze ogólnej można oczywiście użyć każdy odpowiedni stereodeskryptor.

Przykład:



(2*Z*)-but-2-en (PIN)
cis-but-2-en

P-91. GRAFICZNE PRZEDSTAWIANIE I NAZYWANIE STEREOIZOMERÓW

P-91.1 Graficzne przedstawianie stereoizomerów
P-91.2 Stereodeskryptory
P-91.3 Nazywanie stereoizomerów

P-91.1 GRAFICZNE PRZEDSTAWIANIE STEREOIZOMERÓW

Rysunki opisujące konfigurację muszą być sporządzane ze szczególną uwagą. Służą temu zalecenia wydane w 1996 roku (odn. 37). Nowy zestaw zaleceń proponuje obecnie dokument zatytułowany ‘Graphical representation of stereochemical configuration, IUPAC Recommendations 2006’ (odn. 38). ‘Graficzny zapis konfiguracji stereochemicznej, IUPAC, Zalecenia 2006’

W ogólności zwykła linia opisuje wiązania leżące dokładnie w płaszczyźnie rysunku. Wiązania z atomami leżącymi powyżej tej płaszczyzny przedstawiane są jako zaczerniony klin —▬ (startuje się od atomu leżącego w płaszczyźnie rysunku usytuowanego na ostrzu klina); wiązania zaś z atomami usytuowanymi poniżej tej płaszczyzny przedstawia się jako przerywany klin ┈┈┈ interpretowany analogicznie do klina zaczernionego (startuje się od atomu leżącego w płaszczyźnie rysunku usytuowanego na ostrzu klina). Jeżeli konfiguracja nie jest znana, wówczas fakt ten wyraźnie zaznacza się przy użyciu falistej linii o stałej amplitudzie ∿∿∿. W taki sposób rysuje się wiązania w niniejszej książce z wyjątkami występującymi w dziedzinie związków naturalnych, omówionymi dokładnie w rozdziale P-10 dla węglowodanów.

W niniejszym rozdziale pojedynczy zapis graficzny opisuje konfigurację absolutną chiralnej cząsteczki.

P-91.2 STEREODESKRYPTORY

Konfigurację związku organicznego wskazuje w sposób systematyczny jeden lub więcej afiksów dodanych do nazwy, która sama w sobie nie określa konfiguracji; takie afiksy nazywa się ‘stereodeskryptorami’.

P-91.2.1 Zalecane stereodeskryptory
P-91.2.2 Pomijanie stereodeskryptorów

P-91-2.1 Zalecane stereodeskryptory

Stereodeskryptory dzieli się na dwa typy:

P-91.2.1.1 Stereodeskryptory Cahna-Ingolda-Preloga (CIP)
P-91.2.1.2 Stereodeskryptory nie będące stereodeskryptorami CIP

P-91.2.1.1 Stereodeskryptory Cahna-Ingolda-Preloga (CIP)

Wybrane stereodeskryptory opisane w systemie pierwszeństwa Cahna-Ingolda-Preloga (CIP) nazywane ‘stereodeskryptorami CIP’, zalecane są przy wskazywaniu konfiguracji związków organicznych, jak opisano i poparto przykładami w rozdziale niniejszym, a także stosowano w rozdziałach od P-1 do P-8 oraz w nomenklaturze związków naturalnych w rozdziale P-10. Następujące stereodeskryptory używane są jako stereodeskryptory preferowane (patrz P-92.1.2):

(a) ‘*R*’ i ‘*S*’ przy opisie konfiguracji absolutnej tetrakoordynacyjnych (zawierających cztery ligandy) centrów chiralności;

(b) ‘*r*’ i ‘*s*’ przy opisie konfiguracji absolutnej centrów pseudoasymetrycznych;

(c) ‘*M*’ i ‘*P*’ w opisie konfiguracji absolutnej indywiduum aksjalnego lub planarnego przy użyciu reguły helisowości;

(d) ‘*m*’ i ‘*p*’ w opisie konfiguracji absolutnej pseudoasymetrycznej indywiduum aksjalnego lub planarnego przy użyciu reguły helisowości;

(e) ‘*seqCis*’ i ‘*seqTrans*’ przy opisie konfiguracji enancjomorficznych wiązań podwójnych.

Przy określaniu konfiguracji względnej stereodeskryptor ‘*rel*’ połączony z ‘*R*’ lub ‘*S*’ jest preferowany w stosunku do stereodeskryptorów ‘*R**’ lub ‘*S**’. Racematy opisuje się deskryptorem ‘*rac*’, który jest preferowany w stosunku do stereodeskryptorów ‘*RS*’ lub ‘*SR*’.

W nomenklaturze ogólnej zalecane są następujące stereodeskryptory’:

‘R_a’ i ‘S_a’ przy określaniu konfiguracji indywiduów molekularnych o chiralności aksjalnej;

‘R_p’ i ‘S_p’ przy określaniu konfiguracji indywiduów molekularnych o chiralności planarnej;

‘r_a’ i ‘s_a’ przy określaniu konfiguracji pseudoasymetrycznych osi stereogenicznych;

‘r_p’ i ‘s_p’ przy określaniu konfiguracji pseudoasymetrycznych płaszczyzn stereogenicznych;

Stereodeskryptory CIP pisane dużą literą zmieniają się w wyniku operacji odbicia w lustrze (tzn. ‘*R*’ przechodzi w ‘*S*’ i ‘*S*’ przechodzi w ‘*R*’), natomiast stereodeskryptory CIP pisane małą literą są niezmienne względem operacji lustrzanego odbicia (tzn. ‘*r*’ pozostaje ‘*r*’, zaś ‘*s*’ pozostaje ‘*s*’). Są one zapisywane kursywą, aby zaznaczyć, że w porządku alfanumerycznym nie są one brane pod uwagę w pierwszej kolejności (patrz P-16.6).

P-91.2.1.2 Stereodeskryptory nie będące stereodeskryptorami CIP

Stereodeskryptory nie będące stereodeskryptorami CIP dzielą się na dwie kategorie:

P-91.2.1.2.1 Stereodeskryptory stosowane w nomenklaturze podstawnikowej;

P-91.2.1.2.2 Stereodeskryptory stosowane w nomenklaturze związków naturalnych opisane w rozdziale P-10.

P-91.2.1.2.1 Stereodeskryptory używane jako stereodeskryptory preferowane oraz używane w ogólnej nomenklaturze

Stereodeskryptory używane w systematycznych nazwach podstawnikowych przy określaniu konfiguracji w preferowanych nazwach IUPAC oraz używane w nomenklaturze ogólnej (niektóre z nich zalecane są tylko w nomenklaturze ogólnej):

(a) Stereodeskryptory używane w preferowanych nazwach IUPAC

(i) ‘*E*’ i ‘*Z*’ przy opisie konfiguracji diastereomorficznych alkenów $R^1R^2C{=}CR^3R^4$ ($R^1{\neq}R^2$, $R^3{\neq}R^4$ ale ani R^1 ani R^2 nie musi być różne od R^3 lub R^4), kumulenów $R^1R^2C[{=}C{=}]_nCR^3R^4$, układów na przykład $R^1R^2C{=}\ {=}C\{[CH_2]_n\}_2C{=}NOH$. Grupę o wyższym pierwszeństwie spośród grup połączonych z jednym końcowym podwójnie związanym atomem alkenu, oksymu etc. lub kumulenu (tzn. R^1 lub R^2) porównuje się z grupą o wyższym pierwszeństwie spośród grup

połączonych z drugim podwójnie związanym atomem (tzn. R^3 lub R^4). Stereoizomer określa się jako '*Z*' (zusammen = razem) jeżeli obie te grupy leżą po tej samej stronie płaszczyzny odniesienia przechodzącej przez podwójne wiązanie i prostopadłej do płaszczyzny zawierającej wiązania łączące te grupy z atomami węgla tworzącymi podwójne wiązanie. Drugi z izomerów określa się jako '*E*' (entgegen = przeciwny). Deskryptory te mogą być stosowane do struktur z ułamkowym rzędem wiązania, zawierającym się w przedziale między jeden i dwa; a także do podwójnych wiązań łączących pierwiastki inne niż węgiel.

(ii) 'A' i 'C' przy opisie absolutnej konfiguracji centrów stereogenicznych pentakoordynacyjnych (zawierających pięć ligandów, jak w przypadku bipiramidy trygonalnej lub piramidy kwadratowej) i heksakoordynacyjnych (zawierających sześć ligandów, jak w przypadku oktaedru).

(b) Następujące stereodeskryptory zalecane są w ogólnej nomenklaturze:

(i) '*cis*', '*trans*' i '*r*', '*c*', '*t*' używane są, odpowiednio przy określaniu konfiguracji diastereomorficznych podwójnych wiązań (patrz P-93.4.2.1.1) oraz względnej konfiguracji związków alicyklicznych (patrz P-93.5.1.3);

(ii) '*endo*', '*egzo*', '*syn*' i '*anti*' używane są przy określaniu konfiguracji względnej w niektórych pierścieniowych układach von Baeyera (patrz P-93.5.2.2.1).

(c) Stereodeskryptory nie zalecane już w systematycznej nomenklaturze podstwnikowej ale używane w nomenklaturze związków naturalnych (patrz rozdział P-10):

(i) Deskryptory 'D' i 'L' używane przy opisie konfiguracji węglowodanów (odn. 27 i P-102), aminokwasów i peptydów (odn. 18 i P-103) oraz cyklitoli (odn.39 i P-104);

(ii) Deskryptory '*erytro*' i '*treo*', używane są w systematycznej nomenklaturze węglowodanów na równi z takimi deskryptorami jak '*arabino*' i '*gluko*' (patrz odn. 27 i P-102);

(iii) Stereodeskryptory 'α', 'β' używane są w nomenklaturze związków naturalnych przy opisie konfiguracji absolutnej alkaloidów, terpenów oraz terpenoidów, steroidów i innych związków opisanych w P-101;

(iv) Stereodeskryptory '*cis*', '*trans*' oraz '*all-E*' i '*all-trans*' używane są w nomenklaturze karotenoidów i związków o podobnej strukturze (patrz odn. 40 i P-101.6);

(v) Deskryptor '*mezo*' używany jest w nomenklaturze węglowodanów do opisu związków takich, jak alditole i kwasy aldarowe, które są symetryczne i tym samym optycznie nieczynne (patrz P-102.5.6.6.5);

(vi) Stereodeskryptor '*ambo*' opisuje powstawanie stereoizomerów w reakcji niestereogenicznego centrum chiralnej cząsteczki lub reakcji związku chiralnego ze związkiem racemicznym, które zwykle nie tworzą

mieszaniny 50:50. Aby to zaznaczyć używa się przedrostka '*ambo*' (patrz P-93.1.4 i P-103.3.4)

W preferowanych nazwach IUPAC jednostki niestereogeniczne **nie** są uwzględniane i dlatego w preferowanych nazwach IUPAC stereodeskryptor **musi być** poprzedzony lokantem, który określa każdą jednostkę stereogeniczną, jak to podano w rozdziale P-91.3. Gdy konfiguracja nie jest znana albo musi pozostać nieokreślona z uwagi na brak homogeniczności konfiguracyjnej, używa się pisanego kursywą symbolu '*ξ*' lub '*Ξ*' poprzedzonego niezbędnym lokantem (patrz P-91.3). Symbol '*ξ*' (mała grecka litera 'ksi') zastępuje stereodeskryptory CIP pisane małą literą, takie jak '*r*', '*s*', '*m*', '*p*'. Zaś symbol '*Ξ*' (duża grecka litera 'ksi') zastępuje stereodeskryptory CIP pisane dużą literą takie jak '*R*', '*S*', '*M*', '*P*' oraz stereodeskryptory nie będące stereodeskryptorami CIP: '*E*', '*Z*', '*seqCis*' i '*seqTrans*'. Greckie symbole '*ξ*' i '*Ξ*' mogą być używane w ogólnej nomenklaturze.

P-91.2.2 Pomijanie stereodeskryptorów

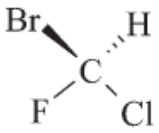
Pomijanie stereodeskryptorów opisujących wiązania podwójne zalecane jest w przypadku od trój- do siedmioczłonowych związków alicyklicznych, w których każde wiązanie podwójne ma ustanowioną konfigurację – '*Z*' w przypadku węglowodorów oraz '*Z*' lub '*E*' w zależności od budowy ligandów otaczających wiązanie podwójne (patrz P-93.5.1.4.1.). Nazwy takie jak cykloheksen czy cyklohepta-1,3,5-trien są jednoznaczne i dodanie stereodeskryptora '*Z*' nie wnosiłoby żadnej dodatkowej informacji. W ośmioczłonowych pierścieniach użycie stereodeskryptora '*Z*' lub '*E*' z odpowiednim lokantem jest niezbędne w preferowanych nazwach IUPAC związków zawierających jedno wiązanie podwójne, takich jak (*Z*)-cyklookten i (*E*)-cyklookten, nie jest niezbędne natomiast w odpowiednich: di-, tri- lub tetraenie takim jak 1,3,5,7-cyklooktatetraen. Począwszy od pierścieni dziewięcioczłonowych używanie stereodeskryptorów jest już niezbędne. Pomijanie stereodeskryptorów jest także zalecane w nazwach układów von Baeyera (P-93.5.2.3), nazwach związków 'spiro' (P-93.5.3.3.), układów skondensowanych (P.93.5.4), układów cyklofanu (P.93.5.5.3) oraz zespołach identycznych pierścieni i układów pierścieni (P-93.5.7).

P-91.3 NAZYWANIE STEREOIZOMERÓW

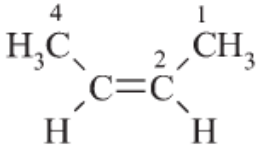
Stereodeskryptory dodaje się są do nazwy konstruowanej zgodnie z procedurą tworzenia preferowanych nazw IUPAC opisaną w rozdziale P-59.1. Zasady wyrażone w regule E-0 z. (odn. 1) i w regule R-7.0 (odn.2) mówiące, że 'stereodeskryptory nie zmieniają nazwy ani numeracji związku wynikającej z zasad, reguł i konwencji opisanych w niniejszych zaleceniach' pozostaje tu ciągle ważna – szczególnie dla preferowanych nazw IUPAC. Zagnieżdżanie symboli mogłoby bowiem zmienić wzór zagnieżdżania ustalony wcześniej przed wprowadzeniem tych afiksów. Kwestię tę omawia i ilustruje P-91.6.

W preferowanych nazwach IUPAC stereodeskryptory umieszcza się bezpośrednio przed tą częścią nazwy, której one dotyczą. Przed całą nazwą umieszcza się je wtedy, gdy dotyczą całego związku macierzystego; umieszcza się je w nawiasie z następującym po nim myślnikiem. Gdy dotyczą one podstawników, umieszczane są przed odpowiadającym podstawnikowi przedrostkiem. Poprzedzane są liczbowym lub literowym lokantem, opisującym pozycję jednostki stereogenicznej, której ten lokant dotyczy. Stosuje się tu ogólne zasady numeracji (patrz P-14.4).

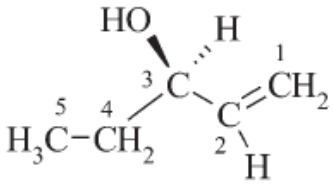
Przykłady:



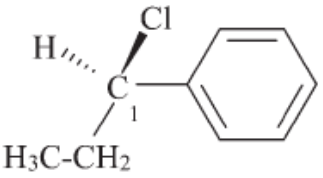
(*R*)-bromo(chloro)fluorometan (PIN)



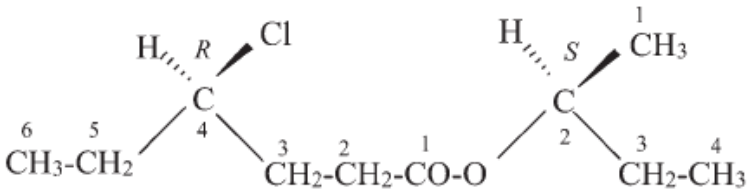
(2*Z*)-but-2-en (PIN)



(3*R*)-pent-1-en-3-ol (PIN)
(patrz P-92.2.1.2.1)



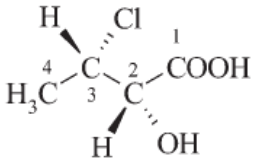
[(1*R*)-(1-chloropropylo)]benzen (PIN)



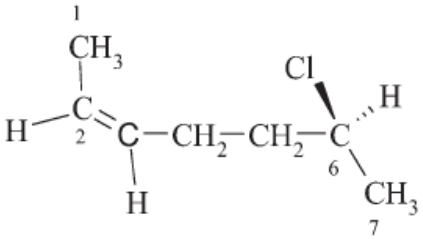
(4*R*)-4-chloroheksanian (2*S*)-butan-2-ylu (PIN)

Gdy cząsteczka zwiera więcej niż jedną jednostkę stereogeniczną, opisaną wyżej procedurę stosuje się do każdej z tych jednostek a konfigurację struktury macierzystej wyraża się w postaci zbioru symboli. W nazwach związków symbole te wraz z ich lokantami zapisuje się w nawiasie i rozdziela przecinkami, po nawiasie umieszcza się myślnik i całość umieszcza przed kompletną nazwą lub nazwą podstawnika. Użyte stereodeskryptory umieszcza się w nazwie w rosnącym porządku odpowiadających tym deskryptorom lokantów.

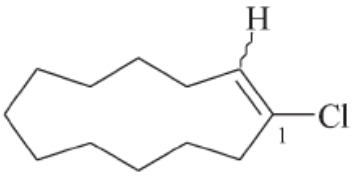
Przykłady:



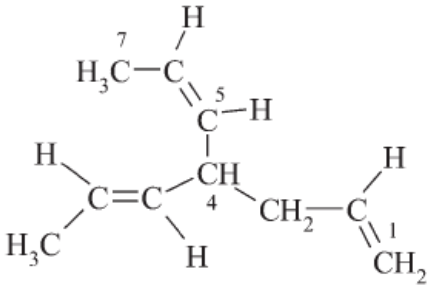
kwas (2*S*,3*S*)-3-chloro-2-hydroksybutanowy (PIN)



(2*Z*,6*S*)-6-chlorohept-2-en (PIN)
(numerowanie – patrz P-14.4)



(1*Ξ*)-1-chlorocyklododek-1-en (PIN)



(5*Z*)-4-[(1*E*)-prop-1-en-1-ylo]hepta-1,5-dien (PIN)

Uwaga! Ponieważ wzór ilustruje jedynie wiązania podwójne, nazwa nie zawiera stereodeskryptora centrum chiralności, którym jest tu atom węgla ‘C-4’.

P-92 SYSTEM PIERWSZEŃSTWA CAHNA-INGOLDA-PRELOGA (CIP) I REGUŁY SEKWENCJI

P-92.1 System Cahna-Ingolda-Preloga (CIP). Ogólna metodologia
P-92.2 Reguła sekwencji **1**
P-92.3 Reguła sekwencji **2**
P-92.4 Reguła sekwencji **3**
P-92.5 Reguła sekwencji **4**
P-92.6 Reguła sekwencji **5**

P-92.1 SYSTEM CAHNA-INGOLDA-PRELOGA (CIP): OGÓLNA METODOLOGIA

P-92.1.1 Jednostki stereogeniczne
P-92.1.2 Reguły przypisywania konfiguracji
P-92.1.3 Reguły sekwencji
P-92.1.4 Hierarchiczne grafy skierowane (digrafy)[1]
P-92.1.5 Eksploracja hierarchicznych digrafów
P-92.1.6 Ranking ligandów – zastosowanie pięciu reguł sekwencji

P-92.1.1 Jednostki stereogeniczne

Jednostką stereogeniczną (tzn. jednostką generującą stereoizomerię) jest ugrupowanie w obrębie molekularnego indywiduum, które można uznać za generujące stereoizomerię. W każdej chiralnej cząsteczce musi być obecna przynajmniej jedna jednostka stereogeniczna. Nie jest jednak odwrotnie – cząsteczka, w której obecne są jednostki stereogeniczne nie musi być chiralna. W preferowanych nazwach IUPAC wszystkie jednostki stereogeniczne muszą być dokładnie określone,

[1] [1] Graf skierowany, w jezyku angielskim directed graph, w skrócie digraph. Proponujemy używanie spolszczonej wersji skrótu: digraf.

chyba że istnieje możliwość pominięcia tego uszczegółowienia na podstawie uwarunkowań omówionych w P-91.2.2.

Chiralność jest własnością obiektu (a tym samym własnością molekularnego indywiduum), polegającą na nienakładalności na swoje odbicie lustrzane. Jeżeli obiekt (indywiduum molekularne) jest nakładalny na swoje odbicie lustrzane, określa się go jako ‘achiralny’. Większość pojęć związanych z zagadnieniem konfiguracji i omawianych w tym rozdziale jest zdefiniowana w literaturze źródłowej (odn. 37).

Podstawowe typy jednostek stereogenicznych obecnych w indywiduach molekularnych zawierających atom mające nie więcej niż cztery ligandy omówione są niżej:

(a) Centrum chiralności. Ugrupowanie atomów złożone z atomu centralnego ‘X’ i rozróżnialnych ligandów ‘a’, ‘b’, ‘c’ i ‘d’, takie, że zamiana miejscami dowolnych dwóch spośród ligandów ‘a’, ‘b’, ‘c’ i ‘d’ prowadzi do stereoizomeru (patrz także P-93.5.3.2).

Przykład:

centrum chiralności oznaczane jako ‘*R*’
dla sekwencji: a > b > c > d

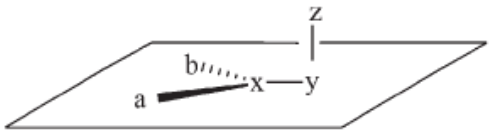
(b) Oś chiralności. Oś, wzdłuż której usytuowany jest zbiór ligandów w sposób prowadzący do trwałego uporządkowania przestrzennego, nienakładalnego na swoje odbicie lustrzane. Przykładowo: w allenie abC=C=Ccd oś chiralności wyznaczona jest przez wiązania C=C=C , zaś w *orto*-podstawionej pochodnej 1,1′-bifenylu atomy ‘C-1’, ‘C-1′’, C-4 i ‘C-4′’ leżą na osi chiralności [patrz odn.37].

Przykład:

oś chiralności oznaczana jako ‘*M*’
dla sekwencji: a > b i m > n

(c) Płaszczyzna chiralności. Planarna jednostka ‘a-x-b’ połączona z sąsiednim fragmentem cząsteczki wychylonym z tej płaszczyzny wiązaniem y-z, co skutkuje ograniczonym skręceniem powodującym, że płaszczyzna ta nie może znaleźć się w płaszczyźnie symetrii.

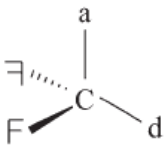
Przykład:



płaszczyzna chiralności oznaczana jako '*M*'
dla sekwencji: a > b

(d) Jednostki stereogeniczne nazywają się pseudoasymetrycznymi (centrum, oś lub płaszczyzna) jeżeli mają rozróżnialne ligandy 'a', 'b', 'c' i 'd', z których dwa i tylko dwa są wzajemnymi nienakładalnymi odbiciami lustrzanymi (są enancjomorficzne). Te enancjomorficzne ligandy oznacza się symbolami: ╒ i ╕ zgodnie z propozycją Preloga i Helmchena (patrz odn. 36). Stereodeskryptory '*r*/*s*' i '*m*/*p*' opisujące pseudoasymetryczne jednostki stereogeniczne są niezmiene względem operacji odbicia lustrzanego (na przykład '*r*' pozostaje '*r*' a '*s*' pozostaje '*s*') ale przechodzą w siebie nawzajem w wyniku zamiany miejscami dowolnych dwóch ligandów ('*r*' staje się '*s*', zaś '*s*' staje się '*r*'). Do opisu pseudoasymetrycznych jednostek stereogenicznych używa się stereodeskryptorów pisanych małą literą.

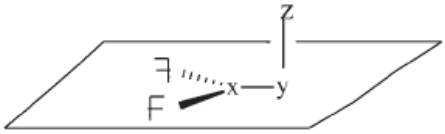
Przykłady:



pseudoasymetryczna jednostka stereogeniczna oznaczana jako '*r*'
dla sekwencji: a > ╒ > ╕ > d
(╒ i ╕ są ligandami enancjomorficznymi)

pseudoasymetryczna jednostka stereogeniczna oznaczana jako '*m*'
dla sekwencji: a > ╒ > ╕ > d

(╒ i ╕ są ligandami enancjomorficznymi)

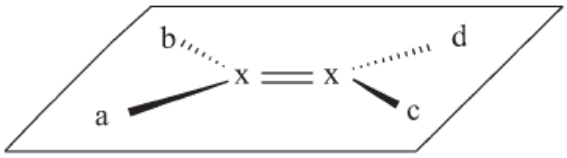


pseudoasymetryczna jednostka stereogeniczna oznaczana jako '*m*'
dla sekwencji: ╒ > ╕

(╒ i ╕ są ligandami enancjomorficznymi)

(e) Izomery *cis*/*trans* zawierające podwójne wiązanie. Ugrupowanie składające się z podwójnego wiązania z różnymi ligandami, które umożliwiają wystąpienie izomerii *cis-trans*.

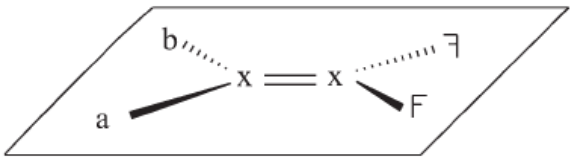
Przykład:



Podwójne wiązanie oznaczane jako '*E*' dla sekwencji: a > b i d > c

(f) Enancjomorficzne wiązanie podwójne

Przykład:



enancjomorficzne wiązanie podwójne oznaczane jako '*seqCis*'
dla sekwencji: a > b i ╒ > ╕
(╒ i ╕ są ligandami enancjomorficznymi)

P-92.1.2 Reguły przypisywania konfiguracji

Rozdział ten opisuje system pierwszeństwa CIP, który został rozwinięty tak, aby obejmować wszystkie związki zawierające atomy o wiązalności do sześciu włącznie dla związków organicznych oraz wszystkie konfiguracje i konformacje tych związków (odn. 34, 35, 36). Jego opis dotyczący sposobu określania konfiguracji i konformacji omawia właśnie niniejszy rozdział.

P-92.1.2.1 Reguła chiralności, stereodeskryptory '*R*', '*S*', 'R_a', 'S_a', 'R_p' i 'S_p'

Dla tetraedrycznej jednostki stereogenicznej zawierającej cztery różne ligandy, reguła chiralności opiera się na uporządkowaniu tych ligandów (z łańcuchami i pierścieniami włącznie) w porządku następstwa określanym często jako porządek pierwszeństwa. Do celów niniejszego opisu porządek ten wygodnie jest zapisać ogólnie: a > b > c > d, gdzie symbol '>' oznacza: 'ma pierwszeństwo przed' lub 'poprzedza'. Ten porządek następstwa uzyskuje się poprzez konstruowanie 'hierarchicznych digrafów' i wykorzystanie opisanych niżej reguł sekwencji.

Reguła chiralności sformułowana została przez Preloga i Helmchena (patrz odn. 36, podrozdział 5.1) w następujący sposób: 'droga kolejności dla ligandów o największym pierwszeństwie oglądana jest od strony przeciwnej względem ligandu o najmniejszym pierwszeństwie i w zależności od tego, czy droga ta skierowana jest w prawo, czy w lewo, jednostka chiralna oznaczana jest symbolem '*R*' lub '*S*', albo – jeżeli jest ona pseudoasymetryczna – symbolem '*r*' lub '*s*'.

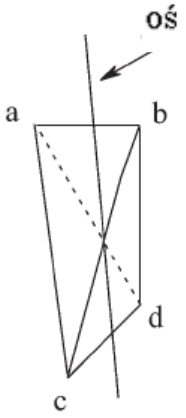
Reguła ta stosuje się do centrów stereogenicznych, stereogenicznych osi i stereogenicznych płaszczyzn.

P-92.1.2.1.1 Centra stereogeniczne

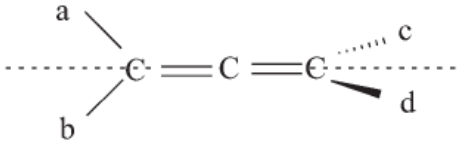
Dla sekwencji a > b > c > d dwa enancjomeryczne centra stereogeniczne opisywane są symbolami '*R*' lub '*S*' w zależności od sensu chiralności zilustrowanego niżej.

P-92.1.2.1.2 Osie stereogeniczne

Struktury z osiową chiralnością rozpatrujemy jak wydłużony tetraedr oglądany wzdłuż osi, przy czym kierunek, w którym patrzy się na ten tetraedr nie ma tu znaczenia (patrz podrozdział 2.5.2, odn. 36). Chiralność aksjalna odnosi się do stereoizomerii będącej konsekwencją nie planarnego uporządkowania czterech grup w pary wokół osi chiralności. Oś chiralności jest to oś, wzdłuż której usytuowany jest zbiór ligandów w sposób prowadzący do trwałego uporządkowania przestrzennego, nienakładalnego na swoje odbicie lustrzane. Na przykład: w allenie abC=C=Ccd oś chiralności wyznaczona jest przez wiązania C=C=C , a w 2,2′,6,6′-czteropodstawionej pochodnej 1,1′-bifenylu atomy: 1, 1′, 4, 4′ leżą na osi chiralności.

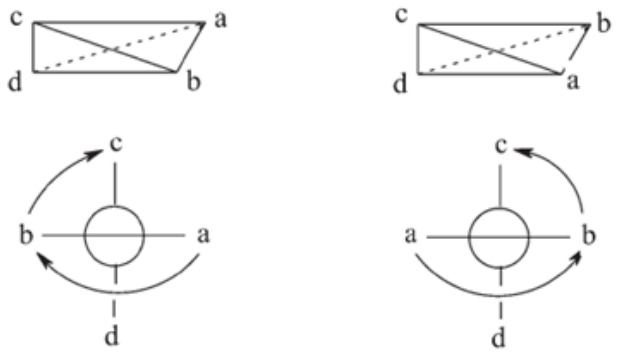


W związkach chiralnych, których chiralność wywodzi się z obecności centrum stereogenicznego niezbędne jest wystąpienie czterech różnych atomów lub grup: 'a', 'b', 'c' i 'd'. W przypadku wydłużonego tetraedru wymóg ten nie jest już potrzebny ze względu na zredukowaną symetrię. Niezbędne jest jedynie, aby 'a' było różne od 'b' zaś 'c' różne od 'd'; tak więc związki zawierające dwie takie same pary ligandów 'a' i 'b' są chiralne, gdy 'a' jest różne od 'b'.



oś chiralności

Konfigurację określa się tu przy użyciu deskryptorów '*P*' (lub 'R_a') i '*M*' (lub 'S_a') przypisywanych następująco:

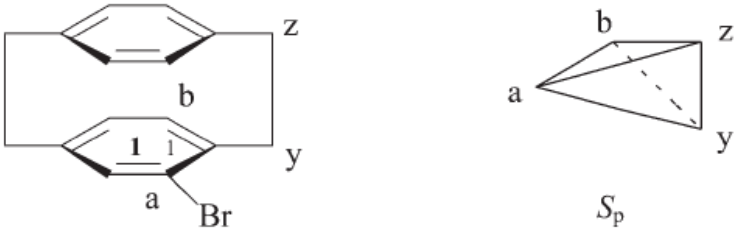


P (lub R_a) *M* (lub S_a)

Ligandy (atomy lub grupy) umieszcza się w układzie wydłużonego tetraedru. Wybiera się dwa podstawniki usytuowane wcześniej w szeregu pierwszeństwa – po jednym z każdej pary – przy użyciu reguły sekwencji. Dla par: a > b i c > d chiralność opisuje się symbolem '*P*' (lub 'R_a'), jeżeli droga od 'a' do 'b' a następnie do 'c' odbywa się zgodnie z ruchem wskazówek zegara, gdy patrzy się w kierunku 'd'. Jeżeli odbywa się ona w kierunku przeciwnym, symbolem chiralności jest '*M*' (lub 'S_a').

P-92.1.2.1.3 Płaszczyzny stereogeniczne

Chiralność planarna jest pojęciem odnoszącym się do stereoizomerii wywodzącej się z usytuowania względem płaszczyzny (płaszczyzny stereogenicznej) grup leżących poza tą płaszczyzną (patrz 2.5.2, odn. 36). Jej przykładem może być atropoizomeria jednopodstawionego cyklofanu, w którym płaszczyzna stereogeniczna jest podstawionym 'amplifikantem fanu' (patrz P-26). Ta konfiguracja jest określana przy użyciu stereodeskryptorów 'R_p' i 'S_p' przypisywanych następująco:



S_p

Tetraedr (tetraedryczną jednostkę stereogeniczną) uzyskuje się przez połączenie leżących w płaszczyźnie atomów 'a' i 'b' z atomami 'y' i 'z'. Sens chiralności uzyskuje się poprzez ustalenie (w oparciu o konwencjonalne reguły) szeregu pierwszeństwa a > b > c > d czyli a > b > y > z dla podanego wyżej cyklofanu. Tak więc do opisu powyższej konfiguracji używa się deskryptora 'S_p' i przyporządkowuje się ją atomowi węgla 'C-1^1'.

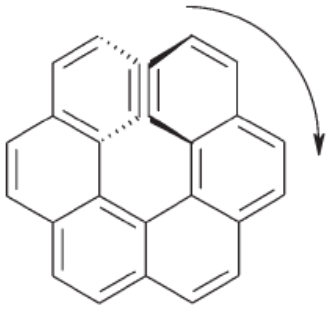
P-92.1.2.2 Reguła helisowości: stereodeskryptory '*M*' i '*P*'

Helisowość jest sensem chiralności indywiduum molekularnego o kształcie helisy, propelera, śruby [patrz odn. 37]. Reguła 'helisowości' została sformułowana przez Preloga i Helmchena (patrz, 5.1, odn. 36) w następujący sposób: w zależności od tego, czy helisa jest lewo- czy prawoskrętna jest ona definiowana odpowiednio jako 'ujemna' (oznaczana symbolem '*M*') lub 'dodatnia' (oznaczana symbolem '*P*').

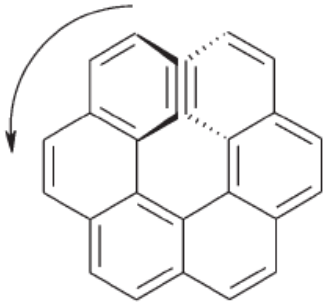
Stosując ten system do opisu konformacji i konfiguracji rozważa się kąt skręcenia między ustalonymi grupami (grupami odniesienia) związanymi z atomami połączonymi tym wiązaniem. Znak mniejszego kąta skręcenia między grupami odniesienia definiuje sens chiralności helisy (patrz: ‘kąt torsyjny’ P-94.2).

P-92.1.2.2.1 Oś stereogeniczna

Chiralność heksahelicenów oznaczana jest stereodeskryptorami ‘*M*’ i ‘*P*’.

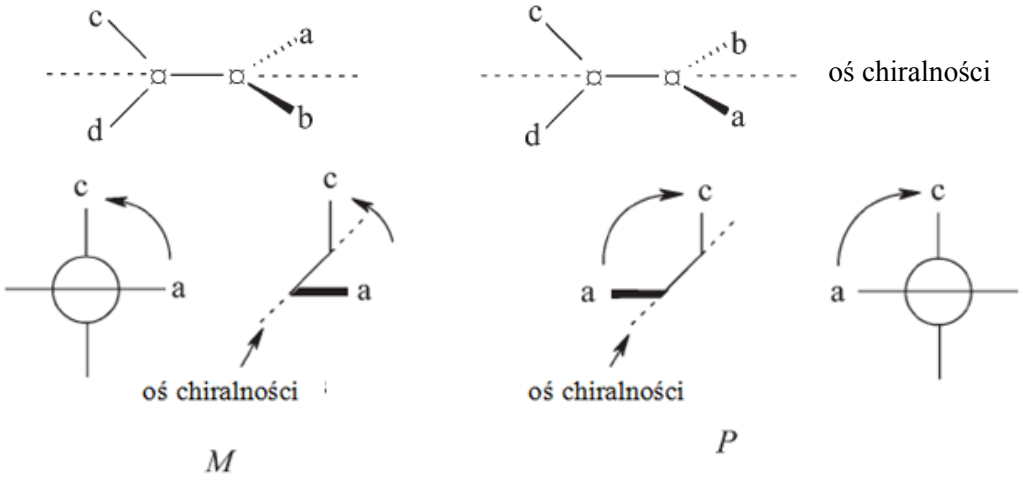


(*P*)-heksahelicen (PIN)



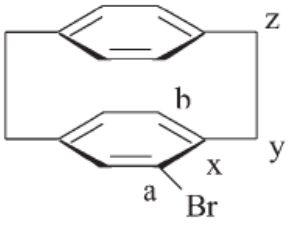
(*M*)-heksahelicen (PIN)

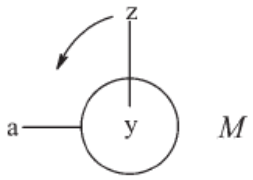
Reguła helisowości może być także stosowana do chiralnych osi w allenach i bifenylach. Patrząc wzdłuż osi chiralności widzi się ligandy uporządkowane w pary. Gdy posuwamy się od bliższego ligandu mającego pierwszeństwo w parze w kierunku dalszego atomu lub grupy mającej pierwszeństwo w parze, chiralność opisuje się symbolem ‘*M*’ wtedy, gdy jest to ruch przeciwny do ruchu wskazówek zegara, zaś symbolem ‘*P*’ wtedy, gdy jest to ruch zgodny z ruchem wskazówek zegara. Stereodeskryptory ‘*M*’ i ‘*P*’ używane są w preferowanych nazwach IUPAC. Najmniejszy lokant na osi stawiany jest przed stereodeskryptorem.



P-92.1.2.2.2 Płaszczyzna stereogeniczna

Stereodeskryptory ‘*M*’ i ‘*P*’ przyporządkowywane są w następujący sposób:





Płaszczyzna odniesienia cząsteczki jest opisana poprzez relację: ‘a > b’. Element leżący poza płaszczyzną i przyłączony do leżącej w płaszczyźnie osi ‘ x – y ‘, oznaczony jest literą ‘z’. Gdy ‘z’ obraca się do płaszczyzny w kierunku grupy ‘a’, która poprzedza grupę ‘b’, kąt skręcenia jest ujemny. Podaną wyżej konfigurację opisuje się stereodeskryptorem ‘*M*’. Najmniejszy lokant w płaszczyźnie odniesienia umieszcza się przed stereodeskryptorem.

P-92.1.2.2.3 Na ogół nie obserwuje się odpowiedniości między stereodeskryptorami ‘*R/S*’ i ‘*M/P*’. Istotnie, porównując opisaną wyżej konwencję do procesu określania konfiguracji ‘*R/S*’ otrzymujemy: dla osi chiralności ‘*M*’ = ‘*R*’ i ‘*P*’ = ‘*S*’, podczas gdy dla płaszczyzny chiralności relacja jest tu odwrotna: ‘*M*’ = ‘*S*’ i ‘*P*’ = ‘*R*’.

P-92.1.3 Reguły sekwencji

Aby określić porządek następstwa (poprzedzania) atomów i grup używa się ‘reguł sekwencji’ (podanych w odn. 34, 35, 36). W tym rozdziale używa się szerszego zbioru reguł zaproponowanego przez autorów: Mata, Lobo, Marshall i Johnson (odn. 41) wraz z modyfikacjami podanymi przez Custera (odn. 42) oraz Hirschmanna i Hansona (odn. 43).

Reguły te oparte są na hierarchicznym porządku właściwości ligandów: właściwościach materialnych i topologicznych ujętych w regułach sekwencji **1** i **2**, właściwościach geometrycznych ujętych w regułach **3** i **4** oraz właściwościach topograficznych ujętych w regule **5**. Właściwości związane z pierwszymi czterema regułami sekwencji są niezmienne względem operacji lustrzanego odbicia, podczas gdy właściwość związana z regułą piątą w trakcie tej operacji ulega zmianie.

Rozróżnia się ligandy monodentne (monowalencyjne, acykliczne) lub n-dentne (cykliczne), jak podano w P-92.2.1.3.

Reguły sekwencji są hierarchiczne tzn. każda reguła musi być wyczerpująco zastosowana w określonym porządku dopóki nie nastąpi jednoznaczne rozstrzygnięcie:

P-92.1.3.1 Reguła sekwencji **1** składa się z dwóch części:

(a) większa liczba atomowa poprzedza mniejszą;

(b) węzeł powtórzonego atomu, któremu odpowiadający węzeł niepowtórzonego atomu jest rdzeniem lub bliższy rdzenia, zajmuje wyższą pozycję niż węzeł powtórzonego atomu, któremu odpowiadający węzeł niepowtórzonego atomu jest dalej od rdzenia.

P-92.1.3.2 Reguła sekwencji **2**

Większa liczba masowa poprzedza mniejszą;

P-92.1.3.3 Reguła sekwencji **3**

Przy rozpatrywaniu podwójnych wiązań lub planarnych atomów związanych z czterema ligandami, konfiguracja *'seqcis' = 'Z'* poprzedza konfigurację *'seqtrans' = 'E'* a ta z kolei poprzedza niestereogeniczne wiązania podwójne.

P-92.1.3.4 Regułę sekwencji **4** najlepiej jest rozpatrywać w trzech częściach:

(a) chiralne jednostki stereogeniczne poprzedzają pseudoasymetryczne jednostki stereogeniczne, a te z kolei poprzedzają jednostki niestereogeniczne.

(b) Gdy dwa ligandy mają różne pary deskryptorów, wówczas ten, w którym pierwsza wybrana para stanowi parę deskryptorów *podobnych*; ma pierwszeństwo przed tym, dla którego odpowiednia para stanowi parę deskryptorów *niepodobnych* (patrz P-92.5.2.1 w kwestii dyskusji i przykładów dotyczących tej reguły)

(i) parami deskryptorów *podobnych* są: *'RR', 'SS', 'MM', 'PP', 'RM', 'SP', 'seqCis/seqCis', 'seqTrans/seqTrans', 'RseqCis', 'SseqTrans', 'MseqCis', 'PseqTrans'* …;

(ii) parami deskryptorów niepodobnych są: *'RS', 'MP', 'RP', 'SM', 'seqCis/seqTrans', 'RseqTrans', 'SseqCis', 'PseqCis' , 'MseqTrans'*….

(c) '*r*' poprzedza '*s*' a '*m*' poprzedza '*p*'

P-92.1.3.5 Reguła sekwencji **5**

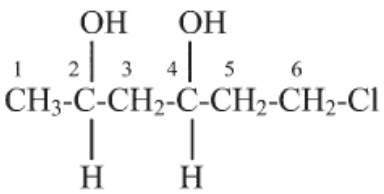
Atom lub grupa opisana deskryptorem *'R', 'M'* i 'seqCis' mają pierwszeństwo przed atomami lub grupami enancjomorficznymi względem nich, opisanymi deskryptorami *'S', 'P'* lub *'seqTrans'*.

P-92.1.4 Hierarchiczne digrafy

Celem ustalenia porządku poprzedzania ligandów w jednostce stereogenicznej, atomy tej jednostki ustawiane są w diagram hierarchiczny zwany 'digrafem ' złożonym z różnych gałęzi (patrz 3 w odn. 36) reprezentujących ligandy. Digraf należy utworzyć dla każdej jednostki stereogenicznej i – gdy w cząsteczce występuje kilka grup stereogenicznych – należy utworzyć kilka digrafów. Każdy atom tworzący szkielet cząsteczki musi być ponumerowany albo przy użyciu zasad numerowania systematycznego stosowanych w nomenklaturze związków organicznych, albo przy zastosowaniu umownego sposobu numerowania, do wyłącznego użytku w regułach pierwszeństwa grup opisanych w P-92.1.6. Osobne reguły stosuje się do cząsteczek acyklicznych, osobne – do podwójnych i potrójnych wiązań i osobne – do cząsteczek cyklicznych.

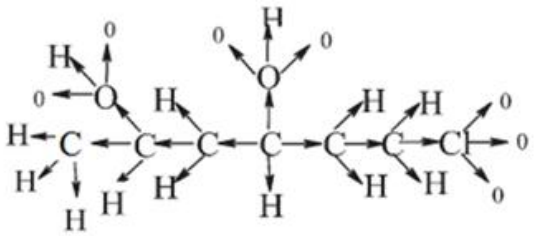
P-92.1.4.1 Cząsteczki acykliczne

Digrafy odpowiadające cząsteczce 6-chloroheksano-2,4-diolu podano niżej:

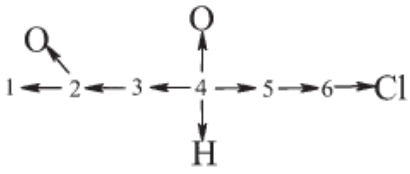


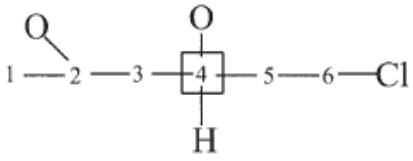
6-chloroheksano-2,4-diol {PIN; wzór w projekcji Fischera [patrz Prolog i Helmchen, poz. (36), podrozdział 3.1; patrz także P-102.3.1]}

Kompletny digraf opisuje wszystkie monodentne ligandy; aby zapewnić tetraligandowość wszystkich atomów oprócz atomu H, wprowadzono *'atomy fantomalne'*. Atomy te mają liczbę atomową równą zero i oznaczane są symbolem '0'. Takie kompletne digrafy użyteczne są w złożonych przypadkach, jednak w większości wypadków dla prostych związków wystarczające są digrafy uproszczone; podają one istotne informacje niezbędne dla uporządkowania ligandów. Niżej przedstawiono dwa typy uproszczonych digrafów, w których symbole atomów szkieletowych zastępuje się lokantami używanymi do opisu cząsteczki. Atomy wodoru i atomy fantomalne pomija się. Graf po prawej stronie, bez strzałek, używany będzie w całym niniejszym rozdziale, z wyraźnym jednak zaznaczeniem, której opisywanej jednostki stereogenicznej on dotyczy.

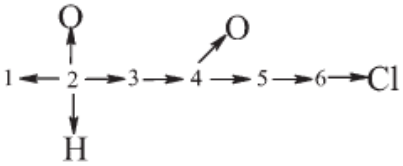


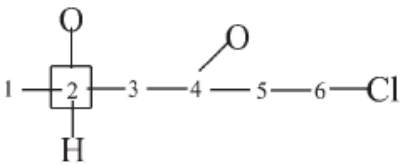
kompletny digraf dla centrum **4**





uproszczony digraf dla centrum **4**

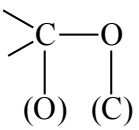




uproszczony digraf dla centrum **2**

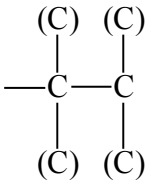
P-92.1.4.2 Wiązania podwójne i potrójne

Użycie reguł sekwencji polega na eksplorowaniu wzdłuż wiązań. Aby uniknąć teoretycznych dyskusji na temat natury wiązań, używa się zapisów klasycznych. Podwójne i potrójne wiązania rozdziela się odpowiednio na dwa lub na trzy wiązania.

Grupa >C=O traktowana jest jako  gdzie (O) i (C) przedstawiają powtórzone

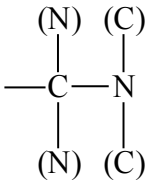
atomy na drugim końcu podwójnego wiązania.

Podobnie grupa –C≡CH traktowana jest jako



gdzie (C) są zapisem powtórzonych atomów leżących na drugim końcu potrójnego wiązania.

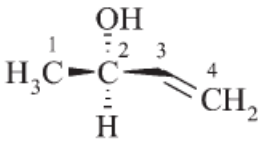
Zaś grupa –C≡N traktowana jest jako

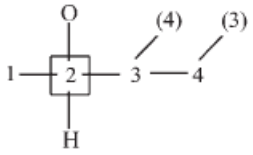


gdzie (C) i (N) są zapisem powtórzonych atomów leżących na drugim końcu potrójnego wiązania.

Powtórzone są jedynie atomy połączone wzajemnie podwójnym wiązaniem, a nie grupy, które są z nimi związane. Powtórzone atomy mogą być zatem postrzegane jako powiązane z trzema atomami fantomalnymi o liczbie atomowej równej zero. Takie podejście może być pomocne przy rozstrzyganiu pierwszeństwa w bardziej skomplikowanych przypadkach.

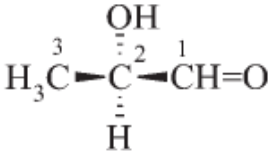
Niżej podano uproszczony digraf odpowiadający nienasyconemu alkoholowi, którym jest but-3-en-2-ol (PIN).

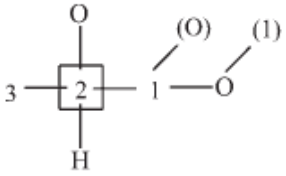




uproszczony digraf zawierający atomy powtórzone

Niżej podano digraf odpowiadający cząsteczce 2-hydroksypropanalu (PIN):



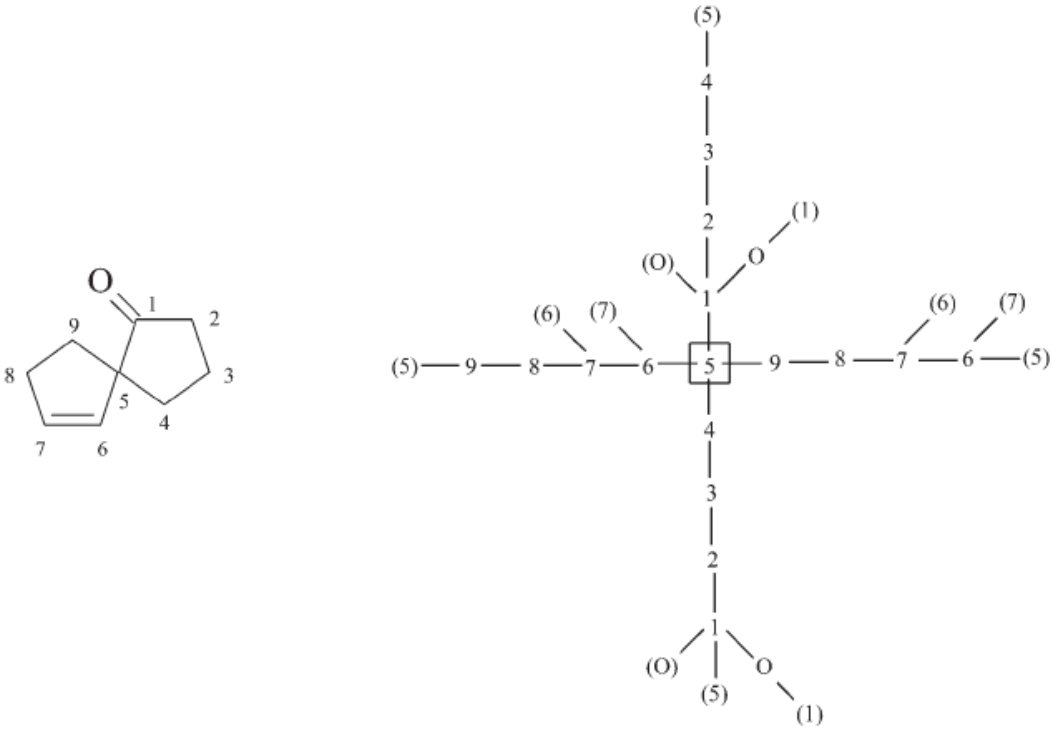


uproszczony digraf pokazujący atomy powtórzone

P-92.1.4.3 Nasycone pierścienie i układy pierścieni

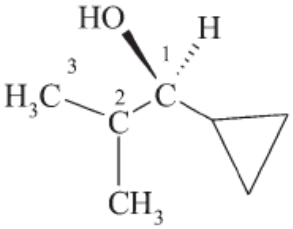
Metodologia przekształcania wzoru konstytucyjnego cyklicznej cząsteczki w acykliczny digraf została przedstawiona przez Preloga i Helmchena (patrz 3.2, odn. 36).

Aby uzyskać acykliczny digraf jednostki stereogenicznej, multidentny ligand przekształca się w *n* ligandów monodentnych, pozostawiając w każdym przypadku nienaruszone jedno wiązanie z rdzeniem i rozszczepiając pozostałe *n*-1 wiązań. Tym samym na końcu każdej z *n* gałęzi przyłączony jest powtórzony atom rdzenia (podobnie, jak w przypadku wiązań wielokrotnych opisanych w P-92.1.4.2).

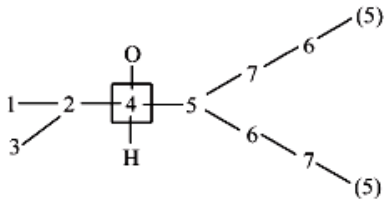


uproszczony digraf dla centrum 5

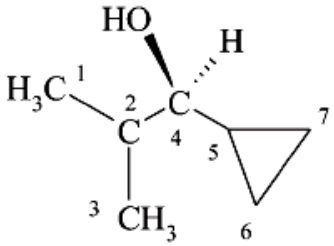
W ligandach jednostki stereogenicznej zawierającej pierścienie, każdy pierścień otwiera się bezpośrednio za pierwszym napotkanym atomem należącym do pierścienia, na każdej drodze zaczynającej się od atomu rdzenia. Jedno wiązanie pozostaje nienaruszone, gdy drugie jest rozszczepione. Na końcach tak utworzonych dwóch gałęzi przyłączony jest powtórzony pierwszy napotkany atom pierścienia.



(1*R*)-1-cyklopropylo-2-metylopropan-1-ol (PIN)



uproszczony digraf dla centrum **4**

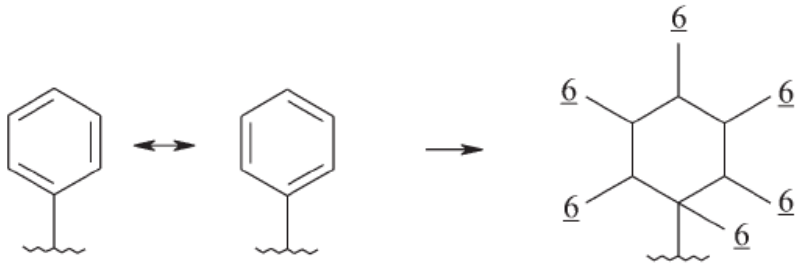


numeracja do uproszczonego digrafu

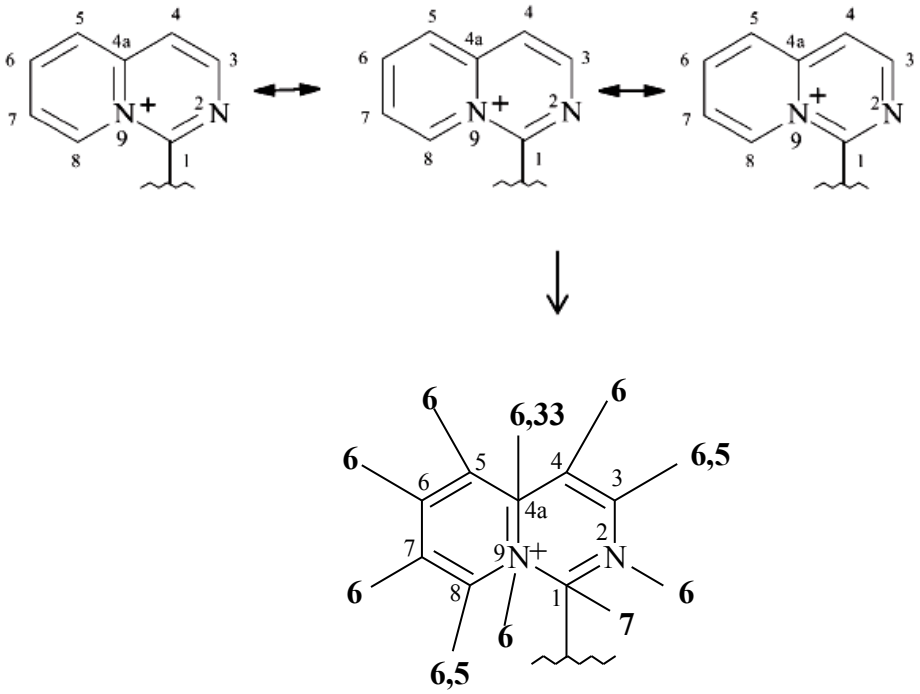
P-92.1.4.4 Pierścienie i zespoły pierścieni mancude

Pierścienie mancude, to znaczy pierścienie lub zespoły pierścieni zawierające maksymalną liczbę nieskumulowanych wiązań podwójnych, zapisuje się jako struktury Kekulego. Dla związków heterocyklicznych typu mancude każdemu powtórzonemu atomowi przypisuje się liczbę atomową, która jest średnią arytmetyczną tych liczb, które otrzymałoby się, gdyby podwójne wiązanie znajdowało się w każdej z możliwych pozycji. Dla węglowodorów mancude nie ma znaczenia której struktury Kekulego się używa, ponieważ rozdzielanie podwójnych wiązań daje ten sam rezultat we wszystkich przypadkach.

Liczba atomowa 6 występuje zawsze, jak to widać w przypadku grupy fenylowej

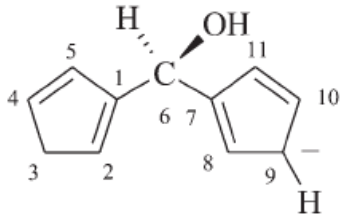


Natomiast w sytuacji, gdy w cząsteczce występują na przykład atomy azotu:

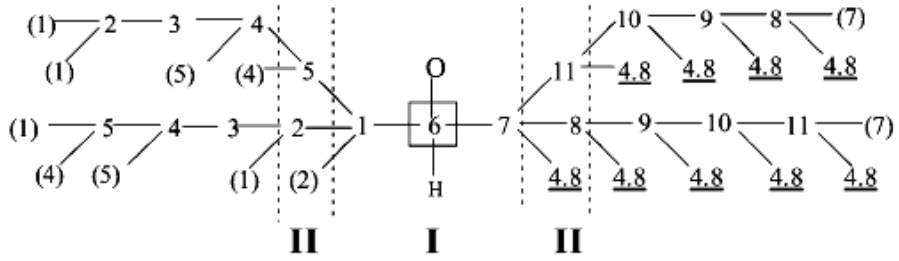


Omówienie: Atom ‘C-1’ jest połączony wiązaniem podwójnym z jednym lub drugim atomem azotu; nie jest natomiast połączony z atomem węgla stąd przypisany mu powtórzony atom ma liczbę atomową 7 (l.a. atomu azotu). Atom ‘C-3’ połączony jest wiązaniem podwójnym z atomem węgla ‘C-4’ (l.a. 6) i z atomem azotu ‘N-2’ (l.a. 7), stąd odpowiadający mu powtórzony atom ma liczbę atomową równą 6,5; podobnie jest dla atomu węgla ‘C-8’. Jednak atom ‘C-4a’ może być połączony wiązaniem podwójnym z atomem ‘C-4’, ‘C-5’ lub ‘N-9’, zatem odpowiadający mu atom powtórzony ma liczbę atomową równą 6 $^{1}/_{3}$.

Przykład:



3-[(*S*)-(cyklopenta-1,4-dien-1-ylo)(hydroksy)metylo]cyklopenta-2,4-dien-1-id (PIN)



uproszczony digraf pokazujący starszeństwo gałęzi ‘C-1’ nad gałęzią ‘C-7’; w sferze **II** liczba atomowa 6 dla ‘C-2’ > 4,8, co prowadzi do przypisania ‘C-6’ konfiguracji ‘*S*’.

Omówienie: Dla ligandu zlokalizowanego po prawej stronie należy rozważyć pięć różnych struktur Kekulego dla każdego atomu węgla pierścienia. Cztery z tych atomów są połączone wiązaniem podwójnym z innym atomem węgla pierścienia, zaś w przypadku piątego atomu należy wziąć pod uwagę parę elektronową o liczbie atomowej równej zero. Zatem 4 x 6 + 0 = 24; 24/5 = 4,8 – taką liczbę atomową należy przypisać każdemu atomowi węgla w ligandzie zlokalizowanym po prawej stronie

P-92.1.5 Eksploracja hierarchicznego digrafu

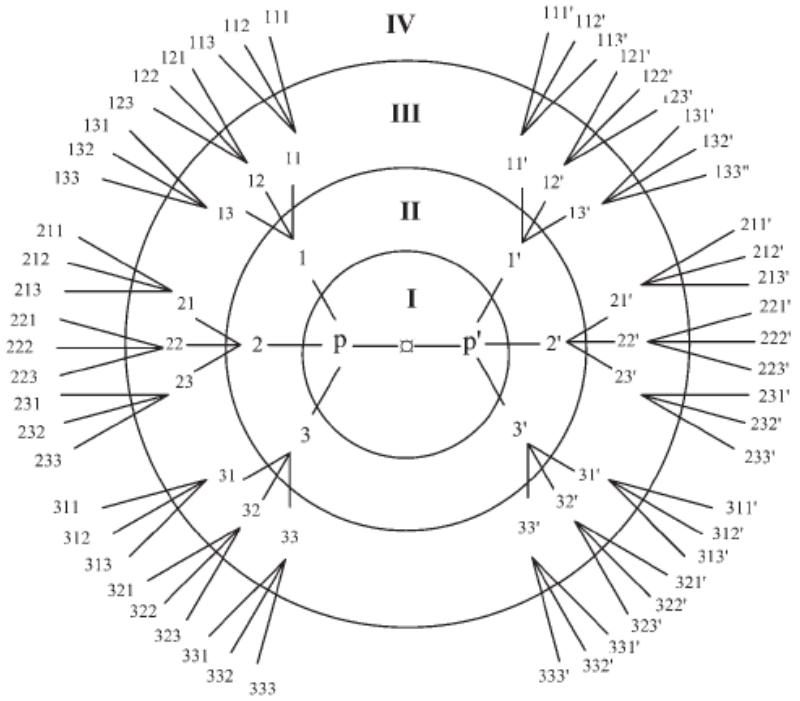
Digrafy konstruuje się po to, aby ukazać ranking atomów pod względem ich topologicznej odległości rozumianej jako liczba wiązań dzielących rozpatrywany atom od rdzenia (czyli od ‘centrum’) jednostki stereogenicznej, a następnie oceny ich pierwszeństwa w oparciu o reguły sekwencji (patrz 3.2, odn. 36).

(a) Atomy zlokalizowane są w sferach, przy czym atomy tak samo odległe od rdzenia jednostki stereogenicznej znajdują się w tej samej sferze. Sfery oznacza się symbolami: **I**, **II**, **III**, **IV** – jak to ilustruje **Rys.1**. Pierwsza sfera zawiera atomy bliższe centrum: ‘p’ i ‘p’ ’. Atomy zawarte w sferze **II** mają numery: ‘1, 2, 3’ i ‘ 1’, 2’, 3’ ’. Atomy zawarte w sferze **III** mają numery ‘11’, ‘12’, ‘13’, ‘21’, ‘22’, ‘23’….. ‘ 11’ ’, ‘ 12’ ’, ‘ 13’ ’…. itd dla każdej następnej sfery. Pokazane na rysunku gałęzie nie muszą występować w każdej cząsteczce.

(b) Atomy n-tej sfery poprzedzają atomy sfery n+1-szej. (reguła rankingu **1**).

(c) Ranking każdego z atomów n-tej sfery zależy przede wszystkim od rankingu w tej samej gałęzi w sferze n–1 – szej a następnie od kolejności wynikającej z zastosowania do niego reguł sekwencji; im mniejszy numer tym wyższy względny ranking (reguła rankingu **2**).

(d) Atomy n-tej sfery, mające to samo miejsce w rankingu (względem atomów sfery n–1 w tej samej gałęzi) szeregowane są w oparciu o reguły sekwencji – najpierw przez wyczerpujące zastosowanie reguły sekwencji **1**, w przypadku braku rozstrzygnięcia wyczerpująco stosuje się regułę sekwencji **2**, itd.



Rys. 1 Porządek rankingu dla dwóch ligandów

P-92.1.6 Ranking ligandów. Zastosowanie reguł sekwencji.

Omówione w P-92.1.3 pięć reguł sekwencji stosuje się tu w następujący sposób:

(a) każdą regułę stosuje się w oparciu o hierarchiczny digraf (patrz P-92.1.4);
(b) każdą regułę stosuje się w wyczerpujący sposób dla wszystkich porównywanych ligandów;
(c) ligand, któremu przysługuje pierwszeństwo przy pierwszym wystąpieniu różnicy w digrafie zachowuje to pierwszeństwo niezależnie od różnic, które mogą wystąpić później w trakcie badania digrafu;
(d) pierwszeństwo atomu w grupie ustalone w wyniku zastosowania reguły nie ulega zmianie po zastosowaniu następnej reguły.

P-92.2 REGUŁA SEKWENCJI **1** (składająca się z dwóch podreguł)

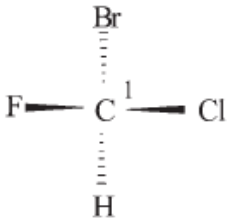
P-92.2.1 Podreguła sekwencji 1a: Ligandy porządkuje się w kolejności malejących liczb atomowych.

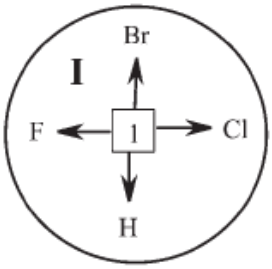
Dla wszystkich przykładów podanych niżej przyjmuje się porządek ligandów: a > b > c > d, o ile nie została określona inna kolejność dla osi lub płaszczyzn stereogenicznych.

P-92.2.1.1 Związki nasycone

P-92.2.1.1.1 Sfera **I**

Przykład 1:



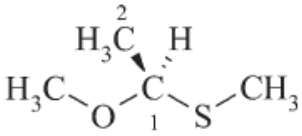


digraf dla sfery I

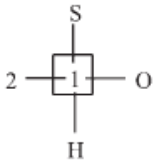
Omówienie: W związku HCBrClF wszystkie atomy znajdują się w sferze **I**. Porządek ‘a > b > c > d’ dla centrum ‘1’ przyjmuje postać: ‘Br > Cl > F > H’ co odpowiada kierunkowi zgodnemu z ruchem wskazówek zegara; konfigurację opisuje się zatem deskryptorem ‘*R*’, co prowadzi do następującej preferowanej nazwy IUPAC:

(*R*)-bromo(chloro)fluorometan (PIN)

Przykład 2:

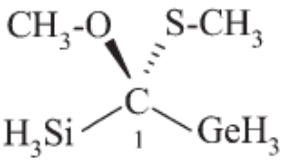


(1R)-1-metoksy-1-(metylosulfanylo)etan (PIN)

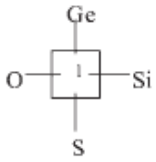


uproszczony digraf dla sfery **I**

Przykład 3:



[(*R*)-germanylo(metoksy)(metylosulfanylo)metylo]silan (PIN)
(lokant ‘1’ podany jest jedynie na użytek digrafu ;
przy tworzeniu nazwy nie jest on potrzebny)

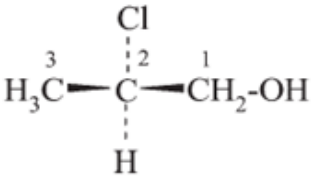


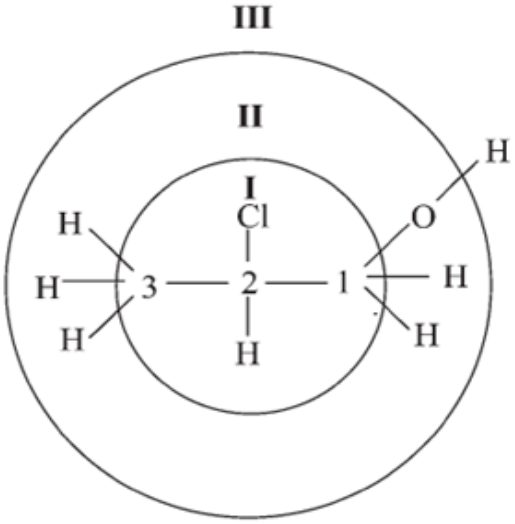
uproszczony digraf
dla sfery **I**

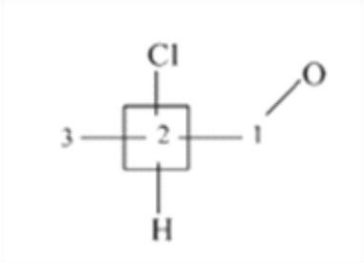
P-92.2.1.1.2 Sfery **I** i **II**

Gdy atomy przyłączone do jednostki stereogenicznej są identyczne, pierwszeństwo ustalane jest w oparciu o te atomy, które przyłączone są z kolei do tych identycznych atomów. Gdy cząsteczka zawiera kilka atomów i gałęzi, należy je ponumerować albo przy użyciu reguł numeracji podanych w nomenklaturze, albo stosując numerację umowną pozwalającą poprawnie opisać wszystkie węzły pojawiające się w digrafie.

Przykład 1:







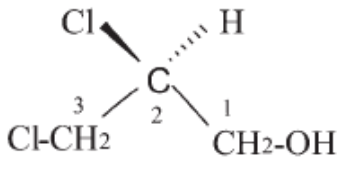
uproszczony digraf

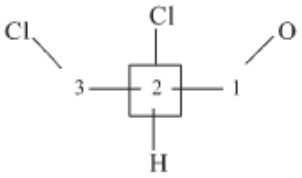
kompletny digraf dla centrum **2**

Omówienie: W podanym wyżej związku H_3C-CHCl-CH_2OH starszeństwo ‘a > b > c > d’ przyjmuje postać: ‘Cl > C = C > H’. W sferze **I** nie można dokonać rozstrzygnięcia, ponieważ dwa najbliższe atomy są identyczne. W sferze **II** atomy przyłączone do dwóch atomów węgla ‘C-1’ i ‘C-3’ są następujące: ‘O,H,H’ i odpowiednio ‘H,H,H’,zatem ponieważ ‘O > H’ wynika z tego porządek pierwszeństwa: ‘C-1 > C-3’; stąd grupa ‘–CH_2OH’ staje się grupą ‘b’, zaś grupa ‘-CH_3’ grupą ‘c’, co prowadzi do następującej preferowanej nazwy IUPAC:

(2*R*)-2-chloropropan-1-ol (PIN)

Przykład 2:



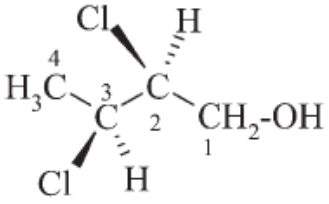


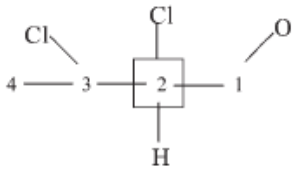
uproszczony digraf

Omówienie: W podanym wyżej związku nie można dokonać rozstrzygnięcia po eksploracji sfery **I** ponieważ ‘Cl > C = C > H’. Rozstrzygnięcia można dokonać w sferze **II,** ponieważ ‘Cl > O’ i tym samym grupa ‘–CH_2Cl’ staje się grupą ‘b’, zaś grupa ‘– CH_2OH’ grupą ‘c’, co prowadzi do następującej preferowanej nazwy IUPAC:

(2*S*)-2,3-dichloropropan-1-ol (PIN)

Przykład 3:





uproszczony digraf dla centrum 2

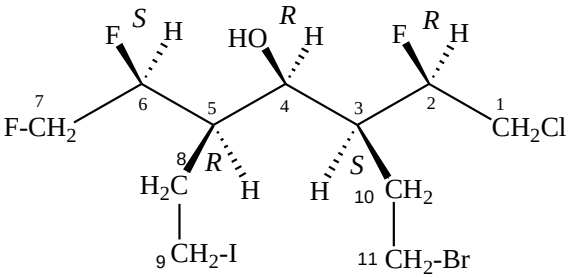
Omówienie: W tym przykładzie, w cząsteczce występują dwa centra stereogeniczne; tym samym niezbędne jest wykonanie dwóch digrafów – po jednym dla każdego centrum stereogenicznego. Digraf dla stereogenicznego atomu w pozycji 2 implikuje ranking: ’Cl > C-3 > C-1 > H’, co pozwala przypisać atomowi’-2’ konfigurację ’*S* ’, Digraf dla stereogenicznego atomu w pozycji 3 prowadzi do rankingu: ’Cl > C-2 > C-4 > H’ i przypisania atomowi C-3 konfiguracji '*S*', co z kolei implikuje następującą preferowaną nazwę IUPAC:

(2*S*,3*S*)-2,3-dichlorobutan-1-ol (PIN)

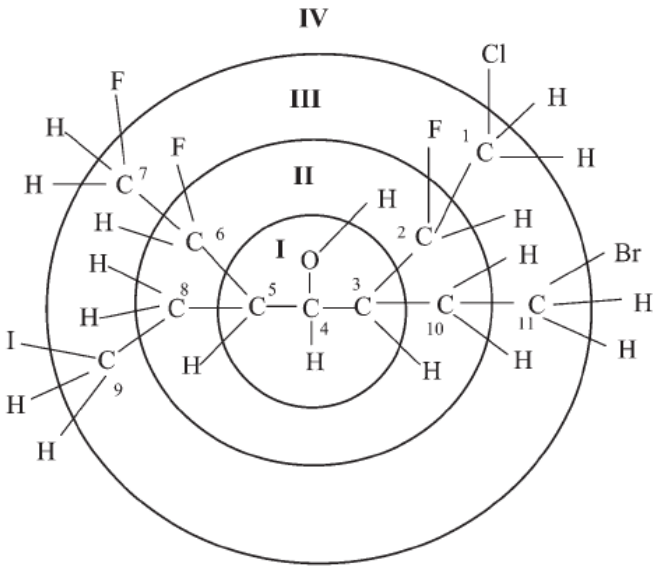
P-92.2.1.1.3 Poza sferami **I** i **II**

`Gdy wyboru nie da się dokonać po rozwinięciu drugiej sfery, procedurę prowadzi się w taki sam sposób oddalając się stopniowo od centrum stereogenicznego.

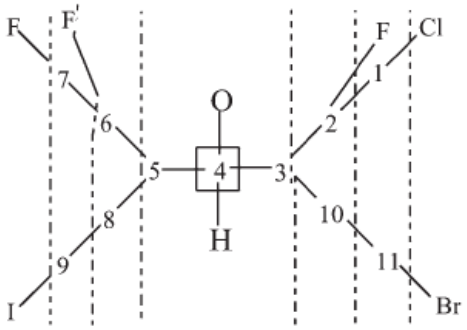
Przykład 1



(2*R*,3*S*,4*R*,5*R*,6*S*)-3-(2-bromoetylo)-1-chloro-2,6,7-trifluoro-5-(2-jodoetylo)heptan-4-ol (PIN)



kompletny hierarchiczny digraf

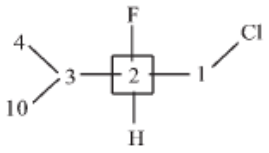


uproszczony digraf

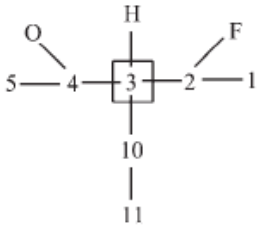
Omówienie: Pierwszy poziom eksploracji digrafu – sfera **I**, prowadzi do rankingu: ‘O > C-3 = C-5 > H’; nie można dokonać rozstrzygnięcia starszeństwa z uwagi na dwa atomy węgla. W sferze **II** dalej brak jest możliwości rozstrzygnięcia z uwagi na jednakowe zestawy: ‘C,C,H’ atomów przyłączonych do atomów węgla sfery **I**. W sferze **III** ranking dwu gałęzi po lewej stronie jest następujący: ‘F,C,H’ > ‘C,H,H’; po prawej stronie ranking dwu gałęzi jest taki sam: ‘F,C,H’ > ‘C,H,H’, co dalej nie pozwala na rozstrzygnięcie; można jednak ustalić ranking dwu gałęzi ‘F,C,H’ poprzedzających ‘C,H,H’ w wyniku dalszej eksploracji digrafu. W sferze **IV** rozpatruje się dwie gałęzie mające pierwszeństwo w sferze **III** i rozstrzygnięcie o pierwszeństwie jest już możliwe, ponieważ ‘Cl,H,H’ poprzedza ‘F,H,H’. Zatem gałęzi po prawej stronie, ‘C-3’ przypisuje się pierwszeństwo ‘b’, zaś gałąź po lewej stronie uzyskuje pierwszeństwo ‘c’. W gałęziach o mniejszym pierwszeństwie w sferze **III** występują: atom jodu i atom bromu. Fakt, że atom jodu ma pierwszeństwo przed atomem bromu nie jest tu brany pod uwagę, ponieważ rozstrzygnięcie o pierwszeństwie już zostało dokonane

Hierarchiczne digrafy należy skonstruować dla każdego centrum stereogenicznego; jednakże konstrukcja prostych digrafów oraz porównywanie ligandów może przebiegać równolegle i przeważnie dla uszeregowania ligandów wystarczające są częściowe digrafy. Takie częściowe digrafy dla centrów ‘C-2’ i ‘C-3’, pozwalające ustalić konfigurację tych

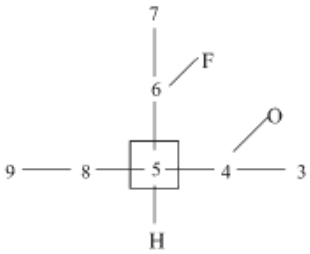
centrów, podane są niżej. Podobne digrafy należy skonstruować dla atomów ‘C-5’ i ‘C-6’.



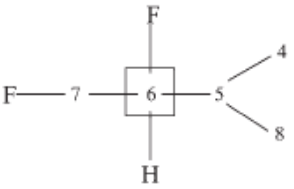
uproszczony digraf dla ‘2’



uproszczony digraf dla ‘3’

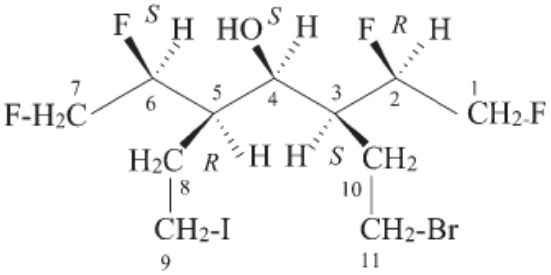


uproszczony digraf dla ‘5’

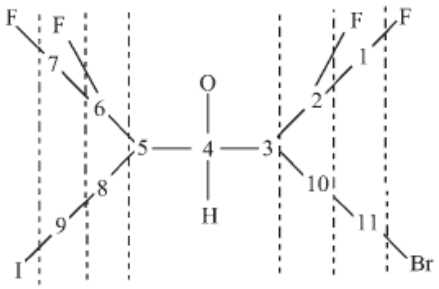


uproszczony digraf dla ‘6’

Przykład 2



(2*R*,3*S*,4*S*,5*R*,6*S*)-3-(2-bromoetylo)-1,2,6,7-tetrafluoro-5-(2-jodoetylo)heptan-4-ol (PIN)



uproszczony digraf

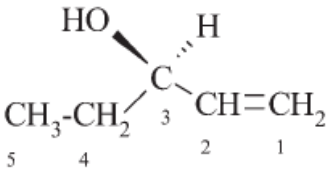
Uwaga: Alkohol ten jest podobny do podanego wyżej w przykładzie 1 z modyfikacją polegającą na zamianie atomu chloru w pozycji 1 w łańcuchu głównym na atom fluoru. Modyfikacja ta prowadzi do inwersji konfiguracji ‘C-4’, co omówiono niżej.

Omówienie: Dla centrum ‘C-4’ ustala się najpierw następujący ranking: ‘O > C-3 = C-5 > H’. Dwie gałęzie o większym pierwszeństwie: ‘C-3,C-2,C-1’ oraz ‘C-5,C-6,C-7’ nie mogą być rozróżnione. Natomiast w gałęziach o mniejszym pierwszeństwie: ‘C-3,C-10,C-11’ oraz ‘C-5,C-8,C-9’ rozstrzygnięcie może być dokonane, ponieważ ‘I > Br’. To pozwala ustalić ranking: ‘O > C-5 > C-3 > H’ i przypisać ‘C-4’ konfigurację ‘*S*’.

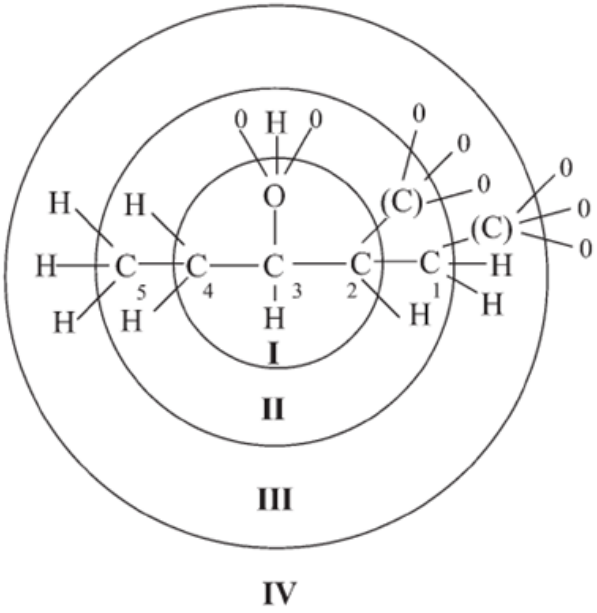
P-92.2.1.2 Wiązania podwójne i potrójne

W digrafach używa się powtórzonych atomów węzłowych opisanych w P-92.1.4.2.

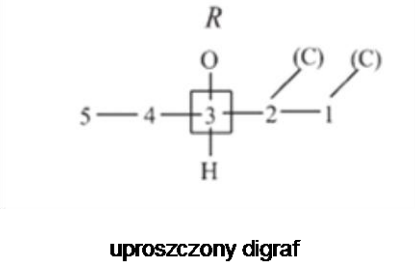
Przykład 1:



(3*R*)-pent-1-en-3-ol (PIN)



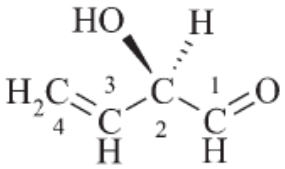
kompletny digraf

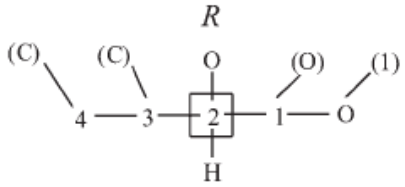


uproszczony digraf

Omówienie: Rozstrzygnięcie o pierwszeństwie nie może nastąpić w sferze **I**, gdzie: ‘O > C-2 = C-4 > H’. W sferze **II** (C) jest powtórzonym atomem węgla i ‘C,(C),H’ ma pierwszeństwo przed ‘C,H,H’, z czego wynika ranking ligandów: ‘C-2 > C-4’ pozwalająca przypisać centrum chiralności ‘C-3’ konfigurację ‘*R*’.

Przykład 2

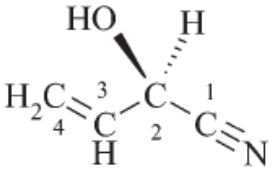


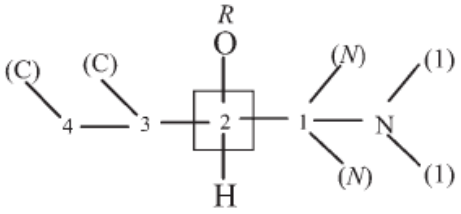


(2*R*)-2-hydroksybut-3-enal (PIN) uproszczony digraf

Omówienie: W sferze **I**, w oparciu o regułę sekwencji **1** ustala się następujący ranking pierwszeństwa: ‘O > C-1 = C-3 > H’. W sferze **II** ‘C-1 > C-3’, ponieważ ‘O,(O),H’ dla grupy –CH=O ma pierwszeństwo przed ‘C,(C),H’ dla grupy –CH=CH_2 co pozwala ustalić końcowy ranking: ‘O > C-1 > C-3 > H’ i przypisać centrum stereogenicznemu konfigurację ‘*R*’.

Przykład 3

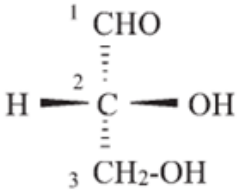




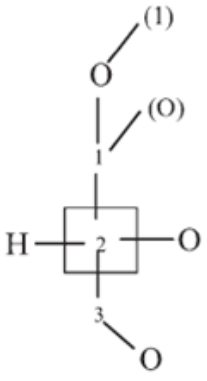
(2*R*)-2-hydroksypent-3-enonitryl (PIN) uproszczony digraf

Omówienie: W sferze **I**, w oparciu o regułę sekwencji **1** ustala się następujący ranking pierwszeństwa: ‘O > C-1 = C-3 > H’. W sferze **II** ‘C-1 > C-3’, ponieważ ‘N,(N),(N)’ dla grupy –C≡N ma pierwszeństwo przed ‘C,(C),H’ dla grupy –CH=CH_2, co pozwala ustalić ostateczny rankig: ‘O > C-1 > C-3 > H’ i przypisać centrum stereogenicznemu konfigurację ‘*R*’.

Przykład 4



(2*R*)-2,3-dihydroksypropanal (PIN)



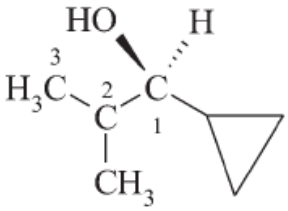
uproszczony digraf

Omówienie: W sferze **I**, w oparciu o regułę rekwencji **1** ustala się następujący ranking pierwszeństwa: ‘O > C-1 = C-3 > H’. W sferze **II** ‘O,(O),H’ dla grupy –CH=O ma pierwszeństwo przed ‘O,H,H’ dla grupy –CH_2OH, co pozwala ustalić końcowy ranking: ‘O > C-1 > C-3 > H’.

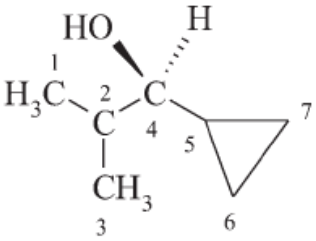
P-92.2.1.3 Nasycone pierścienie i zespoły pierścieni

W digrafach używa się powtórzonych atomów opisanych w P-92.1.4.3.

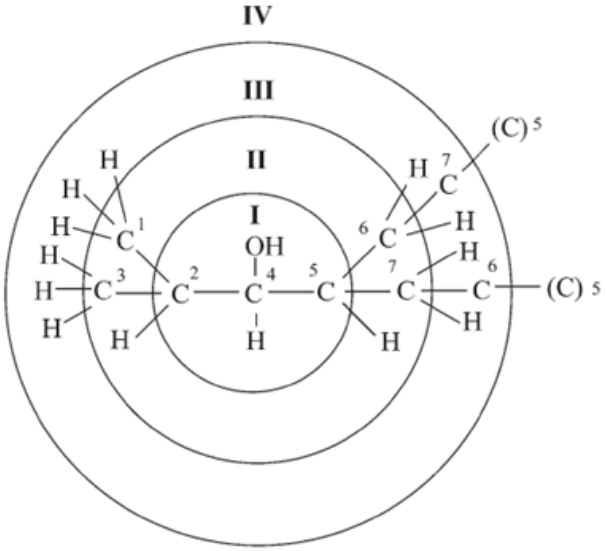
Przykład 1 (porównaj z przykładem 3 podanym niżej):



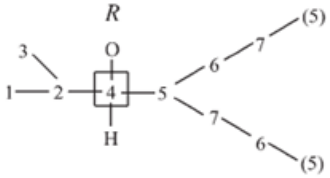
(1*R*)-1-cyklopentylo-2-metylopropan-1-ol (PIN)



numeracja do digrafu



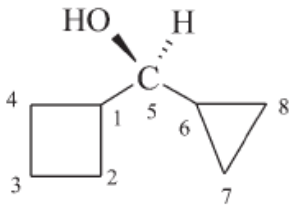
kompletny digraf



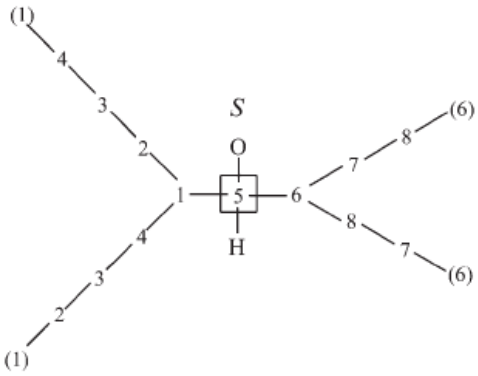
uproszczony digraf

Omówienie: W sferze **I**, w oparciu o regułę sekwencji **1** ustala się następujący ranking pierwszeństwa: ‘O > C-5 = C-2 > H’. W sferze **II** nie można dokonać rozstrzygnięcia, ponieważ do obu gałęzi: ‘C-2(C-1 i C-3)’ oraz ‘C-5(C-6 i C-7)’ przyłączone są atomy ‘C,C,H’. Jednakże w sferze **III** obydwa atomy węgla powiązane z ‘C-5’ (C-6 i C-7) mają ranking ‘C,H,H’, podczas gdy oba atomy węgla powiązane z ‘C-2’ (tzn. C-1 i C-3) mają ranking ‘H,H,H’; tym samym gałąź ‘C-5’ ma pierwszeństwo przed gałęzią ‘C-2’ z czego wynika ostateczny ranking: ‘O > C-5 > C-2 > H’ oraz konfiguracja ‘*R*’ dla centrum stereogenicznego.

Przykład 2



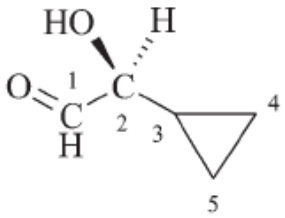
(S)-cyklobutylo(cyklopropylo)metanol (PIN)
(umowna numeracja odpowiadająca uproszczonemu digrafowi po prawej stronie)



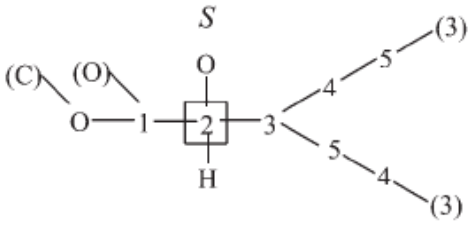
uproszczony digraf

Omówienie: W sferze **I**, w oparciu o regułę sekwencji **1** ustala się następujący ranking pierwszeństwa: ‘O > C-1 = C-6 > H’. W sferze **II** i **III** nie można dokonać rozstrzygnięcia, ponieważ sfery te są identyczne dla obydwu gałęzi digrafu. W sferze **IV** występują tylko węzłowe atomy węgla i w dalszym ciągu brak jest rozstrzygnięcia. Porównując związane z nimi atomy zlokalizowane w sferze **V** można stwierdzić brak atomów powiązanych z atomami powtórzonymi, natomiast z atomami niepowtórzonymi powiązane są: ‘(C),H,H’. Zatem ‘(C),H,H’ ma pierwszeństwo przed ‘niczym’, z czego wynika, że gałąź ‘C-1’ ma pierwszeństwo przed gałęzią ‘C-6’., co pozwala ustalić ogólny szereg pierwszeństwa: ‘O > C-1 > C-6 > H’ oraz konfigurację ‘*S’* dla centrum stereogenicznego.

Przykład 3



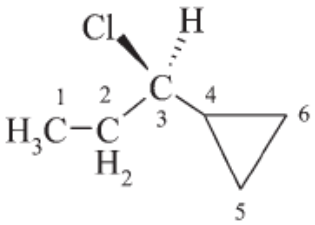
(*S*)-cyklopropylo(hydroksy)acetaldehyd (PIN)
(numeracja umowna do digrafu)



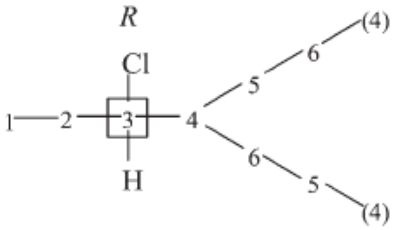
uproszczony digraf

Omówienie: W sferze **I**, w oparciu o regułę sekwencji **1** ustala się następujący ranking pierwszeństwa: ‘O > C-1 = C-3 > H’. W sferze **II** dla gałęzi ‘C-1’ występuje ranking ‘O,(O),H’, natomiast dla gałęzi ‘C-3’ ranking: ‘C,H,H’, co pozwala określić ogólny ranking: ‘O > C-1 > C-3 > H’ i przypisać centrum stereogenicznemu konfigurację ‘*S*’.

Przykład 4 (porównaj z podanym wyżej przykładem 1):



[(1*R*)-1-chloropropylo]cyklopropan (PIN)

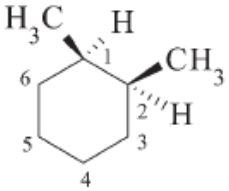


digraf uproszczony

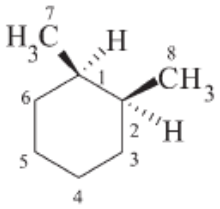
(numeracja umowna dla uproszczonego digrafu)

Omówienie: W sferze **I**, w oparciu o regułę sekwencji **1** ustala się następujący ranking pierwszeństwa: ‘Cl > C-4 = C-2 > H’. W sferze **II** dla gałęzi ‘C-4’ występuje ranking ‘C,C,H’, natomiast dla gałęzi ‘C-2’ ranking: ‘C,H,H’, co pozwala określić ogólny ranking: ‘Cl > C-4 > C-2 > H’ i przypisać centrum stereogenicznemu konfigurację ‘*R*’.

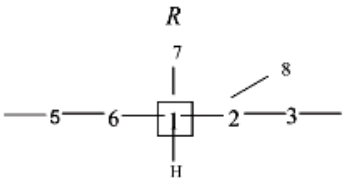
Przykład 5:



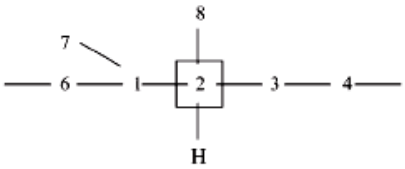
(1*R*,2*S*)-1,2-dimetylocykloheksan (PIN)



(numeracja umowna dla uproszczonego digrafu)



uproszczony digraf dla centrum stereogenicznego C-1



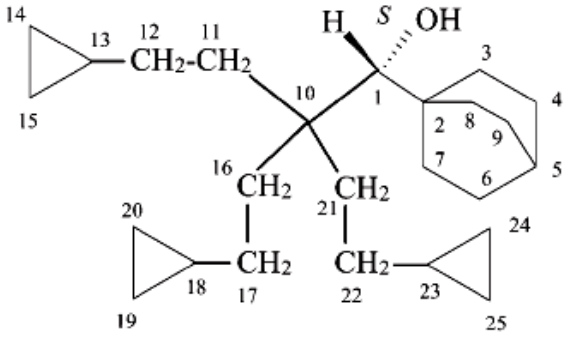
uproszczony digraf dla centrum stereogenicznego C-2

Omówienie: Stosując procedurę określania konfiguracji dla centrum ‘C-1’, w sferze **I**, w oparciu o regułę sekwencji **1**, ustala się następujący szereg pierwszeństwa: ‘C-2 = C-6 = C-7 > H’. W sferze **II** atom ‘C-2’ połączony jest z dwoma atomami węgla i jednym atomem wodoru niewidocznym w digrafie ‚C,C,H’, natomiast atom ‘C-6’ połączony jest z jednym atomem węgla i dwoma atomami wodoru niewidocznymi w digrafie ‘C,H,H’, a ponadto znajdują się w niej trzy atomy wodoru wniesione przez grupę ‘C-7’: ‘H,H,H’. Tym samym w procesie ustalania konfiguracji ‘C-1’ otrzymuje się szereg pierwszeństwa: ‘C,C,H’ > ‘C,H,H’ > ‘H,H,H’, co pozwala określić ogólny szereg pierwszeństwa: ‘C-2 > C-6 > C-7 > H’ i przypisać centrum stereogenicznemu ‘C-1’ konfigurację ‘*R*’. Przy ustalaniu konfiguracji centrum ‘C-2’ stosuje się taką samą procedurę, co pozwala uzyskać ogólny szereg: ‘C-1 > C-3 > C-8 > H’ i przypisać centrum stereogenicznemu ‘C-2’ konfigurację *S*.

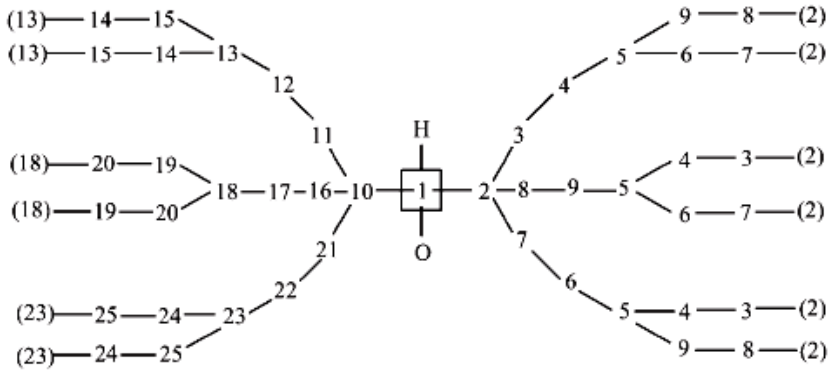
P-92.2.2 Podreguła sekwencji **1b**. Pierwszeństwo a atomy powtórzone

W celu określenia pierwszeństwa grup mających takie samo rozwinięcie przy zastosowaniu podreguły sekwencji **1a** Custer (odn. 42) zaproponował jej modyfikację. Podreguła opiera się na wykorzystaniu atomów powtórzonych i sformułowana jest następująco: ‘powtórzony atom odpowiadający atomowi zlokalizowanemu bliżej miejsca startu eksploracji ma pierwszeństwo przed odpowiadającym atomowi zlokalizowanemu dalej’ lub ujmując krócej: ‘bliższy powtórzony atom węzłowy ma pierwszeństwo przed dalszym powtórzonym atomem węzłowym’. Podregułę tę ilustrują następujące przykłady:

Przykład 1:



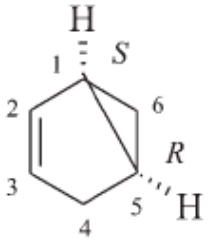
(1*S*)-1-(bicyklo[2.2.2]oktan-1-ylo)-4-cyklopropylo-2,2-bis(2-cyklopropyloetylo)butan-1-ol (PIN)
(numeracja odpowiada podanemu niżej uproszczonemu digrafowi)



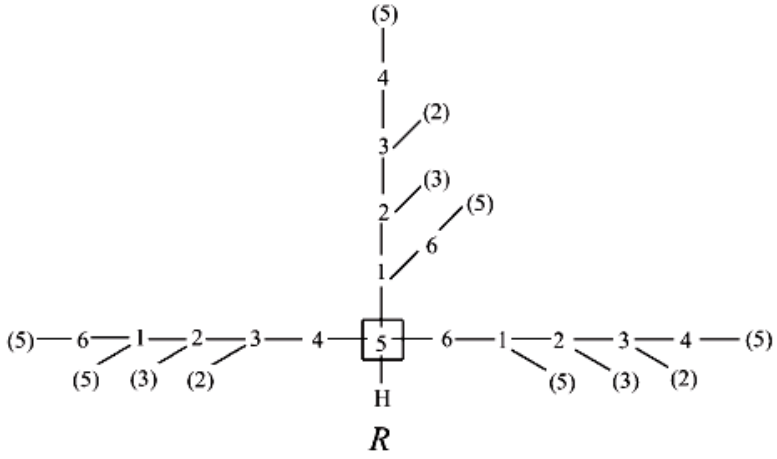
uproszczony digraf

Omówienie: Wszystkie cztery ligandy otaczające centrum ‘C-1’ są różne, ale ligandy otaczające centra: ‘C-2’ i ‘C-10’ w digrafie są w sferze pierwszej identyczne, Jednakże powtórzone atomy po prawej stronie odpowiadają atomowi zlokalizowanemu w sferze **I** (atom C-2 w bicyklo[2.2.2}oktan-1-ylu), podczas gdy atomy powtórzone po lewej stronie odpowiadają atomom zlokalizowanym w sferze **IV** (atomy ‘C-13’, ‘C-18’ i ‘C-23’ grupy cyklopropylowej). Ponieważ zaś bliższe powtórzone atomy węzłowe poprzedzają powtórzone atomy węzłowe zlokalizowany dalej od jądra digrafu ‘C-1’, więc otrzymuje się ranking: ‘O > C-2 > C-10 > H’ a centrum stereogenicznemu ‘C-1’przypisuje się konfigurację ‘*S*’.

Przykład 2:



(1*S*,5*R*)-bicyklo[3.1.0]heks-2-en (PIN)



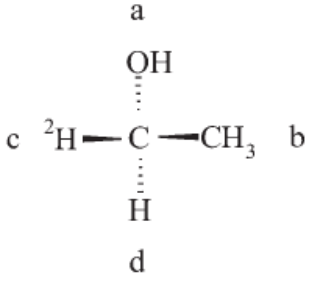
uproszczony digraf

Omówienie: Porównanie ligandów ‘C-4’ i ‘C-6’ pozwala stwierdzić, że są one podobne za wyjątkiem tego, że pierwszy powtórzony atom po prawej stronie (połączony z atomem ‘C-1’) odpowiada centrum stereogenicznemu, zaś pierwszy powtórzony atom po stronie lewej (połączony wiązaniem z ‘C-3’) odpowiada atomowi zlokalizowanemu w sferze trzeciej ‘(C-2)’. Ponieważ zaś powtórzony atom bliższy miejsca startu eksploracji poprzedza dalszy powtórzony atom, więc otrzymuje się ranking: ‘C-1 > C-6 > C-4 > H’ a centrum stereogenicznemu ‘C-5’ przypisuje się konfigurację ‘*R*’. Digraf przypisuje największe pierwszeństwo ligandowi ‘C-1’ i najmniejsze – ligandowi ‘H’.

P-92.3 REGUŁA SEKWENCJI **2.** Większa liczba masowa poprzedza mniejszą liczbę masową.

Gdy w cząsteczce obecne są izotopy, wówczas zastosowana w pierwszej kolejności reguła sekwencji **1** ignoruje różnice izotopowe występujące między skądinąd identycznymi atomami lub grupami. Gdy nie można dokonać rozstrzygnięcia w kwestii pierwszeństwa, wówczas bierze się pod uwagę różnice między izotopami, szeregując je w porządku malejącej liczby masowej, tzn. ‘^{3}H > ^{2}H > ^{1}H (lub H)’ i ‘^{81}Br > Br > ^{79}Br’ (Br *oznacza tu naturalnie występującą mieszaninę izotopów*).

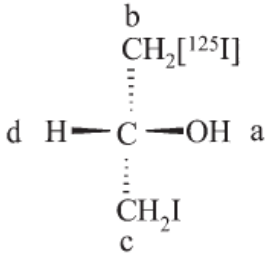
Przykład 1:



(1*R*)-(1-^{2}H$_1$)-etan-1-ol (PIN)

Omówienie: Po zastosowaniu reguły sekwencji **2** szereg pierwszeństwa: ‘a > b > c > d’ uzyskuje postać: ‘ O > C > ^{2}H > H’ a centrum stereogenicznemu przypisuje się konfigurację ‘*R*’.

Przykład 2:



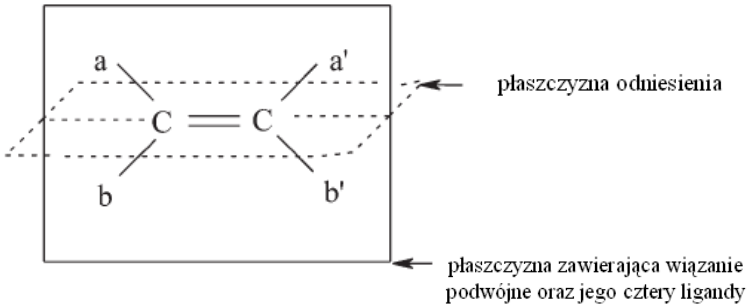
(2*R*)-1,3-[1-^{125}I]dijodopropan-2-ol (PIN)

Omówienie: Po zastosowaniu reguły sekwencji **2** szereg pierwszeństwa: ‘a > b > c > d’ uzyskuje postać: ‘OH > CH_2[^{125}I] > CH_2I > H’ a centrum stereogenicznemu przypisuje się konfigurację ‘*R*’.

P-92.4 REGUŁA SEKWENCJI **3**

P-92.4.1 ‘*seqcis*’ = ‘*Z*’ i ‘*seqtrans*’ = ‘*E*’.

Dla diastereomorficznych wiązań podwójnych, do opisu izomerów *cis-trans* używa się stereodeskryptorów ‘*E*’ i ‘*Z*’. Atom lub grupę o większym pierwszeństwie (ustalonym w oparciu o reguły sekwencji CIP) spośród dwu przyłączonych do jednego z pary atomów podwójnie związanych, porównuje się z mającym pierwszeństwo atomem lub grupą połączoną z drugim podwójnie związanym atomem. Gdy obydwa te atomy lub grupy o większym pierwszeństwie zlokalizowane są po tej samej stronie płaszczyzny odniesienia używa się pisanego kursywą stereodeskryptora ‘*Z*’; jeżeli zaś atomy lub grupy o większym pierwszeństwie zlokalizowane są po przeciwnych stronach płaszczyzny odniesienia, używa się pisanego kursywą stereodeskryptora ‘*E*’. Stereodeskryptory te wywodzą się z języka niemieckiego: ‘*Z*’ – od słowa ‘zusammen’ (razem), zaś ‘*E*’ – od słowa ‘entgegen’ (naprzeciw).

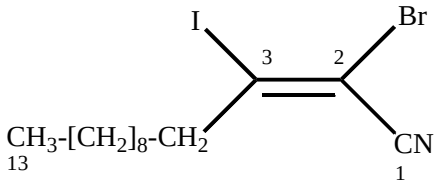


W P-91.2.1 stereodeskryptory ‘*E*’ i ‘*Z*’ sklasyfikowano jako nie będące stereodeskryptorami CIP. Powód tego jest taki, że nie rozróżniają one geometrycznie diastereomorficznych wiązań podwójnych, których deskryptory są niezmienne względem operacji lustrzanego odbicia (‘zwykłe’ wiązania podwójne) od wiązań podwójnych, które pod względem geometrycznym są enancjomorficzne i których stereodeskryptory zmieniają się w trakcie tej operacji. W systemie CIP

deskryptory zmienne względem tej operacji zapisuje się dużą literą (na przykład: '*R*' i '*S*'), podczas gdy deskryptory niezmienne względem operacji lustrzanego odbicia zapisywane są małą literą (na przykład '*r*' i '*s*'). Fakt, że deskryptory '*E*' i '*Z*' pisane są dużą literą pozostaje w sprzeczności z ich statusem niezmienności względem operacji lustrzanego odbicia. Z tego powodu Hirschman i Hanson (odn. 43) zaproponowali, użycie w charakterze stereodeskryptorów CIP następujących deskryptorów: '*seqcis*', '*seqtrans*' oraz '*seqCis*' i '*seqTrans*'.

Gdy omawia się zagadnienie oznaczania konfiguracji, używa się stereodeskryptorów CIP w znaczeniu: '*seqcis*' = '*Z*' i '*seqtrans*' = '*E*'. W nazwach używa się deskryptorów '*E*' i '*Z*'. Związana jest z tym jednak pewna niedogodność polegająca na tym, że przy numerowaniu związków zawierających diastereomorficzne podwójne wiązania, tradycyjna relacja '*cis*' ma pierwszeństwo przed relacją '*trans*', i tym samym grupa oznaczona symbolem '*Z*' ma pierwszeństwo przed '*E*' pomimo odmiennego porządku alfabetycznego tych symboli.

Przykład:



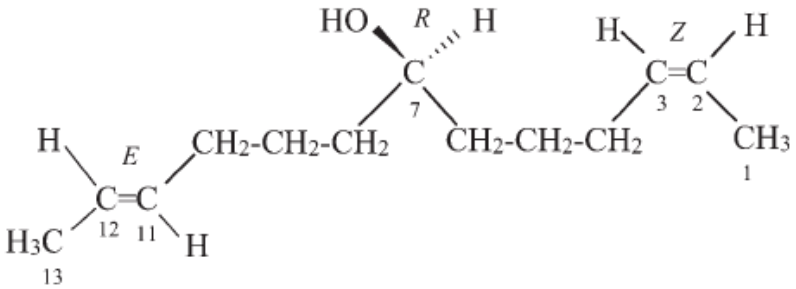
(2Z)-2-bromo-3-jodotridec-2-enonitryl (PIN)

Omówienie: W tym związku zastosowanie reguły sekwencji **1** opisanej w P-92.2.1 pozwala stwierdzić pierwszeństwo atomu 'I' przed łańcuchem w pozycji '3' i podobnie w pozycji '2': pierwszeństwo atomu 'Br' przed 'C' grupy 'CN'. Zatem konfiguracja podwójnego wiązania jest '*Z*' (po porównaniu położenia atomu 'I' w pozycji '3' i atomu 'Br' w pozycji '2')

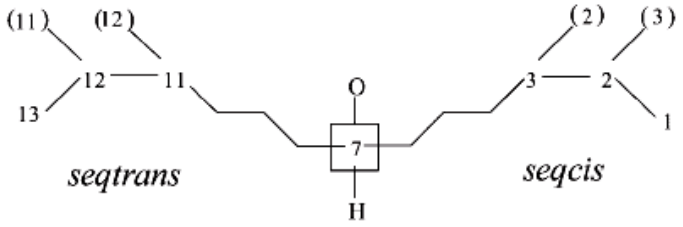
P-92.4.2 Reguła sekwencji **3**: '*seqcis*' ('*Z*') poprzedza '*seqtrans*' ('*E*') a ten porządek poprzedza z kolei wiązania podwójne niestereogeniczne..

P-92.4.2.1 Zastosowanie reguły sekwencji **3** pozwala określić konfigurację związku zawierającego wiązania podwójne '*cis*' i '*trans*' w sytuacji, gdy kolejne zastosowanie reguł sekwencji **1** i **2** nie daje ostatecznego rozstrzygnięcia (patrz: Mata, Lobo, Marshall i Johnson, odn. 41).

Przykład 1:

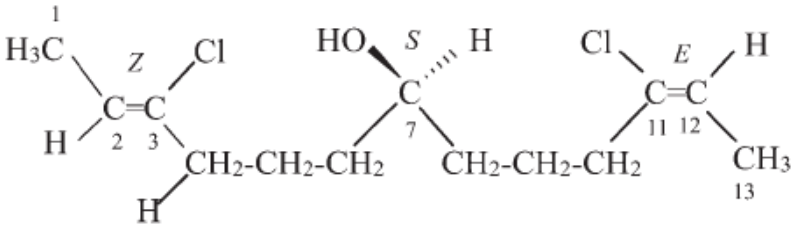


(2*Z*,7*R*,11*E*)-trideka-2,11-dien-7-ol (PIN)

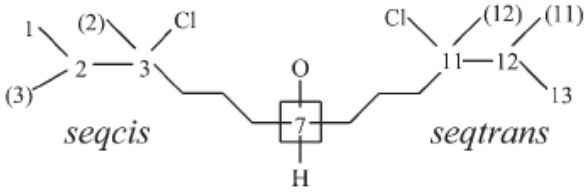


uproszczony digraf pozwalający określić ranking: '*seqcis*' = (*Z*) > '*seqtrans*' = (*E*) oraz przypisać 'C-7' konfigurację '*R*'.

Przykład 2:



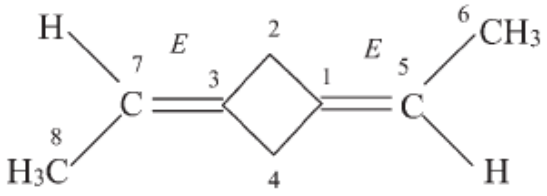
(2*Z*,7*S*,11*E*)-3,11-dichlorotrideka-2,11-dien-7-ol (PIN)



uproszczony digraf pozwalający ustalić ranking: '*seqcis*' = (*Z*) > '*seqtrans*' (*E*) oraz przypisać 'C-7' konfigurację *S*.

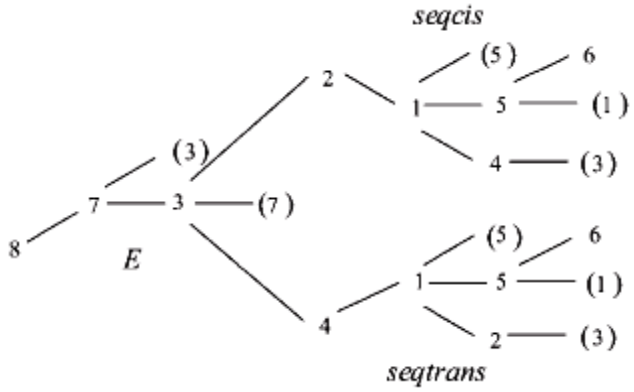
P-92.4.2.2 Gdy przyporządkowanie konfiguracji podwójnym wiązaniom nie jest bezpośrednio możliwe, stosuje się stereodeskryptory pomocnicze. W opisanym niżej przykładzie tworzy się digraf otwierając czteroczłonowy pierścień w sposób opisany w P-92.2.1.3 i tworząc w ten sposób dwie gałęzie, z których jedna zawiera podwójne wiązanie o konfiguracji '*seqcis*' (*Z*), a druga – o konfiguracji '*seqtrans*' (*E*), z ligandami ułożonymi w sposób uwidoczniony w digrafie.

Przyporządkowanie tych stereodeskryptorów jest przejściowe, jednak umożliwia definitywne przypisanie konfiguracji pozostałemu podwójnemu wiązaniu zlokalizowanemu na 'C-3' poprzez wykorzystanie reguły sekwencji **3**, '*seqcis* > *seqtrans*'. Tym samym, grupie etylidenowej zlokalizowanej w pozycji '1' można definitywnie przyporządkować stereodeskryptor '*E*' a także: stereodeskryptor '*E*' – grupie etylidenowej zlokalizowanej w pozycji '3'.



(1*E*,3*E*)-1,3-dietylidenocyklobutan (PIN)
1,3-di[(1*E*)-etylideno]cyklobutan
(*E*)-1,3-dietylidenocyklobutan

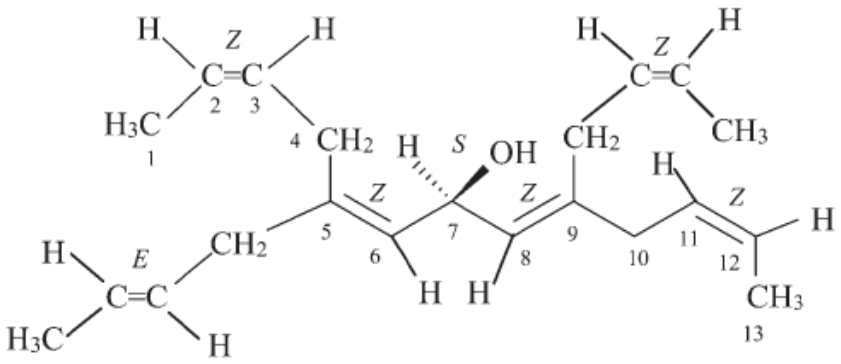
Omówienie: Aby oznaczyć konfigurację podwójnych wiązań, ligandy obydwu tych wiązań należy uszeregować. Chodzi tu oczywiście o ligandy ‘C-5’ i ‘C-7’. Jednakże proces szeregowania ligandów w pozycjach ‘C-1’ i ‘C-3’ jest zabiegiem kompleksowym i wymaga użycia deskryptorów pomocniczych. Poniższy digraf ze specyficzną numeracją uzasadnia konfigurację ‘*E*’ w pozycji ‘C-3’. Ponieważ digraf jest acykliczny, możliwe jest zobrazowanie podwójnego wiązania ‘C-1’ gdy usytuuje się ligandy w sposób widoczny w digrafie. Występują tu pomocnicze deskryptory, które są różne w gałęziach ‘C-2’ i ‘C-4’, co umożliwia ustawienie ligandów w rankingu: ‘C-2 > C-4’.



uproszczony digraf

W nazwach do opisu obydwu wiązań używa się stereodeskryptora ‘*E*’. Dwa stereodeskryptory umieszcza się w nawiasie, na początku nazwy, poprzedzając każdy z nich lokantem określającym pozycję podwójnego wiązania w pierścieniu. Tego sposobu nazewnictwa używa się przy tworzeniu preferowanych nazw IUPAC. Jest on preferowany względem kolejnego sposobu, przyporządkowującego podwójne wiązanie grupie stanowiącej podstawnik. Trzeci sposób uwzględnia podejście, które traktuje stereodeskryptor ‘*E*’ jako opisujący całą cząsteczkę zawierającą ‘rozszerzone wiązanie podwójne’.

Przykład 2:



(2*Z*,5*Z*,7*S*,8*Z*,11*Z*)-5-[(2*E*)-but-2-en-1-ylo]- 9-[(2*Z*)-but-2-en-1-ylo]trideka-2,5,8,11-tetraen-7-ol (PIN)

uproszczony digraf ukazujący jednostki stereogeniczne (*seqcis* i *seqtrans*) i niestereogeniczne (*nonstg*)

Omówienie: Porównując wiązania podwójne stwierdza się (startując od rdzenia digrafu), że pierwsze porównywane podwójne wiązania to: wiązanie w pozycji 'C-5', które ma konfigurację '*seqcis*' i wiązanie w pozycji 'C-9', które jest niestereogeniczne. Umożliwia to określenie szeregu pierwszeństwa ligandów: 'O > C-6 > C-8 > H' oraz przypisanie centrum chiralności konfiguracji '*S*'.

P-92.5 REGUŁA SEKWENCJI **4**

Gdy nie jest możliwe rozstrzygnięcie o kolejności pierwszeństwa przy użyciu reguł sekwencji **1**, **2** i **3**, stosuje się opisaną niżej regułę sekwencji **4.** Na potrzeby tego rozdziału reguła sekwencji **4** została uproszczona i ograniczona jedynie do stereodeskryptorów najczęściej spotykanych w nomenklaturze związków organicznych – tzn. '*R*', '*S*', '*r*' i '*s*'.

Należy wyraźnie zaznaczyć, że do analizy wszystkich centrów stereogenicznych niezbędne są pełne digrafy. Deskryptory wyszczególniane w digrafie mogą odpowiadać deskryptorom finalnym albo tymczasowym (pomocniczym) użytym wyłącznie w celu określenia porządku ligandów i nigdy nie występującym jako deskryptory finalne.

Uproszczoną wersję reguły sekwencji **4**, dotyczącą jedynie centrów stereogenicznych można wyrazić następująco:

(a) chiralna jednostka stereogeniczna poprzedza pseudoasymetryczną jednostkę stereogeniczną, ta zaś poprzedza jednostkę niestereogeniczną;

(b) gdy dwa ligandy mają różne pary deskryptorów, wówczas ligand mający pierwszą napotkana parę deskryptorów *podobnych* poprzedza ligand mający parę deskryptorów *niepodobnych*:

(i) pary deskryptorów '*podobnych*' to: '*RR*', '*SS*'
(ii) pary deskryptorów '*niepodobnych*' to: '*RS*', '*SR*';

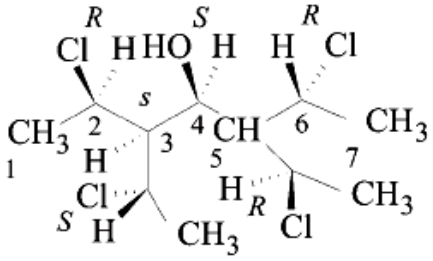
(c) '*r*' poprzedza '*s*'.

Wygodnie jest podzielić regułę sekwencji **4** na podreguły.

P-92.5.1 Podreguła sekwencji **4a**

Chiralna jednostka stereogeniczna poprzedza pseudoasymetryczną jednostkę stereogeniczną, ta zaś poprzedza jednostkę niestereogeniczną.

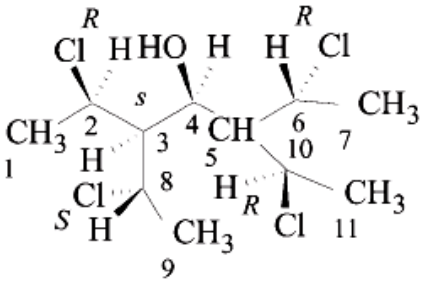
Przykład:



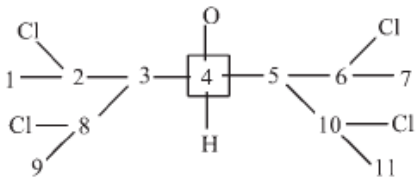
(2*R*,3*s*,4*S*,6*R*)-2,6-dichloro-5-[(1*R*)-1-chloroetylo]-3-[(1*S*)-1-chloroetylo]heptan-4-ol (PIN)

Uwaga: Łańcuch główny numeruje się tak, aby lokanty centrów stereogenicznych były najmniejsze; zbiór stereodeskryptorów '2*R*,4*S*,6*R*' w łańcuchu głównym jest preferowany w stosunku do zbioru '2*S*,4*S*,6*R*' na podstawie reguły sekwencji **5** (patrz: P-92.6).

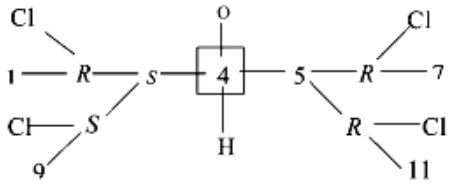
Omówienie: Przygotowując się do konstrukcji digrafów dokonuje się ponownej numeracji cząsteczki. W oparciu o zasady podane w P-92.1.4.1 konstruuje się digrafy dla wszystkich centrów stereogenicznych, co pozwala określić konfigurację centrów 'C-2', 'C-6', 'C-8' i 'C-10'. Konstruuje się także digrafy dla sprecyzowania konfiguracji centrów: 'C-3' i 'C-5'. Konfigurację centrów 'C-2', 'C-6' i 'C-10' określa się jako '*R*' na podstawie reguły sekwencji **1**. W oparciu o tę samą regułę, konfigurację centrum 'C-8' określa się jako '*S*'. Konfigurację centrum 'C-3' rozstrzyga się jako '*s*' w oparciu o kolejność dwóch ligandów określoną na podstawie reguły sekwencji **5** (patrz niżej: '*R*' poprzedza '*S*'); 'C-5' jest centrum niestereogenicznym, ponieważ jest ono podstawione dwoma identycznymi grupami (konfiguracja obu centrów jest '*R*'). To pozwala ustalić szereg pierwszeństwa: O > C-5 > C-3 > H i prowadzi do przypisania centrum 'C-4' konfiguracji '*S*'. Proste digrafy niezbędne do określenia konfiguracji centrum 'C--4' podane są niżej:



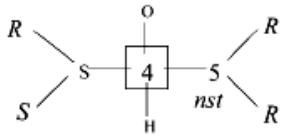
umownie ponumerowana cząsteczka do uproszczonego digrafu :



pierwszy uproszczony digraf zmodyfikowany w wyniku wprowadzenia konfiguracji w pozycjach 'C-2', 'C-3', 'C-5', 'C-6', 'C-8' i 'C-10', w sposób podany wyżej



kolejny uproszczony digraf y prezentujący istotne informacje niezbędne dla określenia konfiguracji centrum ‘C-4’



Końcowy uproszczony digraf pokazujący, że cztery ligandy zlokalizowane wokół jednostki stereogenicznej ‘C-4’ są różne i mogą być uszeregowane następująco: ‘OH > pseudoasymetryczna jednostka stereogeniczna > jednostka niestereogeniczna (*nst*) > H’. Zatem centrum ‘C-4’ należy przypisać konfigurację ‘*S*’

P-92.5.2 Podreguła sekwencji **4b**

Gdy dwa ligandy mają różne pary deskryptorów, wówczas ligand mający parę deskryptorów *podobnych* poprzedza ligand mający parę deskryptorów *niepodobnych*:

(i) pary deskryptorów *podobnych* to: ‘*RR*’, ‘*SS*’;

(ii) pary deskryptorów *niepodobnych* to: ‘*RS*’, ‘*SR*’

P-92.5.2.1 Metodologia łączenia ligandów w pary

Mata i Lobo (odn. 41) zaproponowali ostatnio nową metodologię na miejsce opisanej wcześniej przez Preloga i Helmchena (patrz podrozdział 5.4, odn. 36). Regułę łączenia stereodeskryptorów w pary formułuje się następująco: w każdym z ligandów dla centrów chiralnych wskazuje się deskryptor odniesienia określony jako ***R*** lub ***S*** (nie związany z żadnym węzłem w digrafie) mający następujące właściwości:

(a) związany jest z węzłem najwyższego rzędu odpowiadającym chiralnej jednostce ligandu

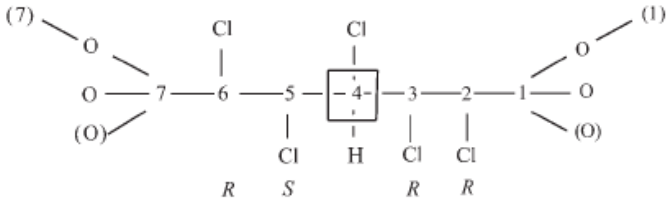
(b) występuje najczęściej w zbiorze równoważnych węzłów najwyższego rzędu lub

(c) jeżeli oba deskryptory (***R*** i ***S***), występują sekwencyjnie w tej samej liczbie w zbiorze równoważnych węzłów najwyższego rzędu to:

(i) jeżeli zbiór deskryptorów odniesienia jest różny w obu ligandach, wówczas ligand z jednym deskryptorem odniesienia ma pierwszeństwo przed tym, który posiada dwa deskryptory odniesienia

(ii) jeżeli obydwa ligandy mają tę samą liczbę deskryptorów odniesienia, wówczas deskryptor odniesienia łączy się w parę z każdym deskryptorem, określonym jako *R* lub *S*, powiązanym z węzłami odpowiadającymi jednostce chiralnej przy uwzględnieniu jego sposobu powiązania oraz hierarchii w digrafie. W poniższym digrafie o konfiguracji centrum ‘C-4’ decydują cztery ligandy: ‘Cl’, ‘H’ oraz dwie

gałęzie ‘C-3,C-2,C-1’ (gałąź prawa) i ‘C-5,C-6,C-7’ (gałąź lewa) o następującym sposobie powiązania oraz porządku starszeństwa węzłów

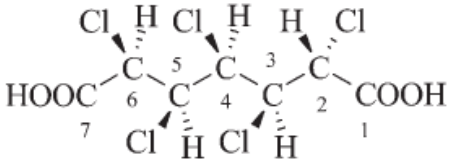


uproszczony digraf

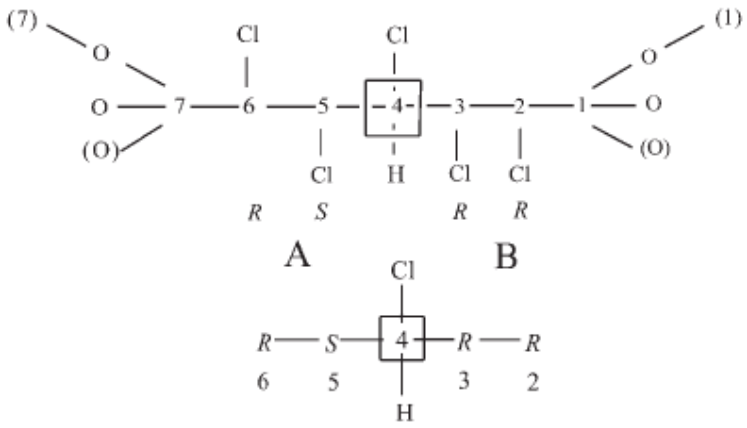
Deskryptory ‘*R*’ i ‘*S*’ uwidocznione w digrafie dla centrów ‘C-2’, ‘C-3’, ‘C-5’ i ‘C-6’ określone zostały na podstawie reguły sekwencji **1**; deskryptory odniesienia ‘***R***’ i ‘***S***’, wybiera się w oparciu o hierarchiczny porządek węzłów, ‘C-3’ dla gałęzi prawej i ‘C-5’ dla gałęzi lewej; zatem deskryptor ‘***R***’ przyporządkowuje się gałęzi prawej (ponieważ centrum ‘C-3’ ma konfigurację ‘*R*’), zaś deskryptor ‘***S***’ – gałęzi lewej (ponieważ centrum ‘C-5’ ma konfigurację ‘*S*’). Zatem parę ‘***RR***’ przyporządkowuje się węzłom ‘C-3’ i ‘C-2’, parę ‘***SS***’ przyporządkowuje się węzłowi ‘C-5’, zaś parę ‘***SR***’ – węzłowi ‘C-6’. Pary ‘***RR***’ i ‘***SS***’ są parami deskryptorów *podobnych*, zaś ‘***RS***’ i ‘***SR***’ – parami deskryptorów *niepodobnych*. Do par zawierających deskryptory odniesienia stosuje się teraz Regułę Sekwencji **4**; porównuje się je w hierarchicznym porządku odpowiadających im węzłów, ‘C-3’ i ‘C-5’, a potem ‘C-2’ i ‘C-6’. W wyniku porównania dwu *podobnych* par ‘***RR***’ dla ‘C-3’ i ‘***SS***’ dla węzła ‘C-5’ nie może nastąpić rozstrzygnięcie, natomiast możliwe jest ono po porównaniu podobnej pary ‘***RR***’ dla węzła ‘C-2’ i *niepodobnej* pary ‘***SR***’ dla węzła ‘C-6’, ponieważ gałąź z parą *podobną* ma pierwszeństwo przed gałęzią z parą *niepodobną*. Ostateczny porządek ligandów jest więc następujący: Cl > C-3 > C-5 > H, co implikuje dla centrum ‘C-4’ konfigurację ‘*R*’.

P-92.5.2.2 Zastosowanie metodologii podanej w rozdziale P-92.5.2.1 ilustrują podane niżej przykłady; Sformułowane w tym rozdziale kryteria stosowane są zgodnie z wymogiem w następującym porządku: (a), (b), (c), (i) oraz (ii) – o ile jest to konieczne. Przykłady od 1 do 4 ilustrują kryterium (a), przykład 5 – kryterium (b), przykład 6 – kryterium (c) i następujące po nim podkryterium (i). Przykład 6 w rozdziale P-92.6 ilustruje kryterium (c).

Przykład 1:



kwas (2*R*,3*R*,4*R*,5*S*,6*R*)-2,3,4,5,6-pentachloroheptanodiowy (PIN)



deskryptor odniesienia

S ***R***

pary deskryptorów

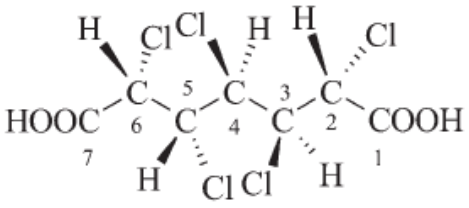
S,5 → *l* ***R***,3 → *l*

S,6 → *u* ↔ ***R***,2 → *l*

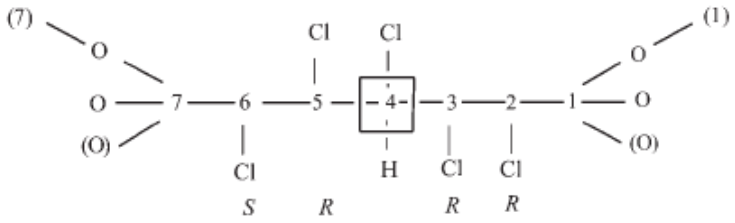
A < B

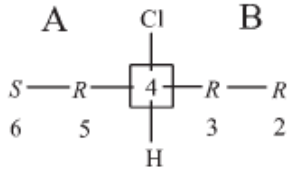
Omówienie: W tym przykładzie konfiguracje centrów ‘C-2’, ‘C-3’, ‘C-5’ i ‘C-6’ określa się w oparciu o ranking ligandów dokonany na podstawie Reguły Sekwencji **1**. W każdej gałęzi (ligandzie) A i B digrafu najwyżej sklasyfikowany węzeł określa deskryptor odniesienia: ‘***R***’ dla gałęzi B i ‘***S***’ dla gałęzi A. Pary deskryptorów tworzy się łącząc deskryptor odniesienia z każdym deskryptorem (oznakowanym swoim lokantem) poczynając od rdzenia digrafu. Opisane są one jako ‘*l*’ i ‘*u*’; *podobnymi* parami są ‘***RR***’ lub ‘***SS***’, zaś *niepodobnymi* parami są ‘***R****S*’ lub ‘***S****R*’. Porównanie par między gałęziami osiąga się w oparciu o malejący ranking hierarchiczny. Przy pierwszej różnicy para *podobna* ma pierwszeństwo przed parą *niepodobną* co prowadzi do przyporządkowania ‘C-4’ konfiguracji ‘*R*’.

Przykład 2:



kwas (2*R*,3*R*,4*R*,5*R*,6*S*)-2,3,4,5,6-pentachloroheptanodiowy (PIN)





deskryptor odniesienia

R ***R***

pary deskryptorów

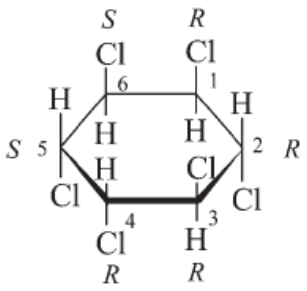
R ,5 → *l* ***R*** ,3 → *l*

R ,6 → *u* ↔ ***R*** ,2 → *l*

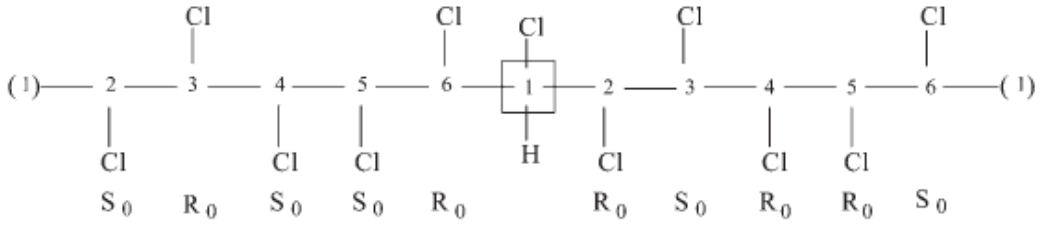
A < B

Omówienie: W tym przykładzie konfiguracje centrów ‘C-2’, ‘C-3’, ‘C-5’ i ‘C-6’ określa się w oparciu o ranking ligandów dokonany na podstawie reguły sekwencji **1**. W każdej gałęzi (ligandzie) A i B digrafu, najwyżej sklasyfikowany węzeł określa deskryptor odniesienia: ‘***R***’ dla obydwu gałęzi. Pary deskryptorów tworzy się łącząc deskryptor odniesienia z każdym deskryptorem (oznakowanym swoim lokantem) poczynając od rdzenia digrafu. Opisane są one jako ‘*l*’ i ‘*u*’; *podobnymi* parami są ‘***R****R*’ lub ‘***S****S*’, zaś *niepodobnymi* parami są ‘***R****S*’ lub ‘***S****R*’. Porównanie par między gałęziami osiąga się w oparciu o malejący ranking hierarchiczny. Przy pierwszej różnicy para *podobna* ma pierwszeństwo przed parą *niepodobną* co prowadzi do przyporządkowania ‘C-4’ konfiguracji ‘*R*’.

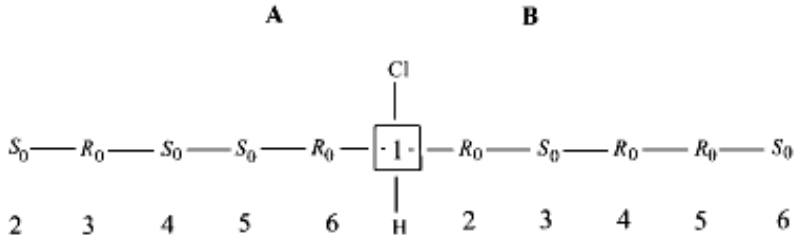
Przykład 3:



(1*R*,2*R*,3*R*,4*R*,5*S*,6*S*)-1,2,3,4,5,6-heksachlorocykloheksan (PIN)



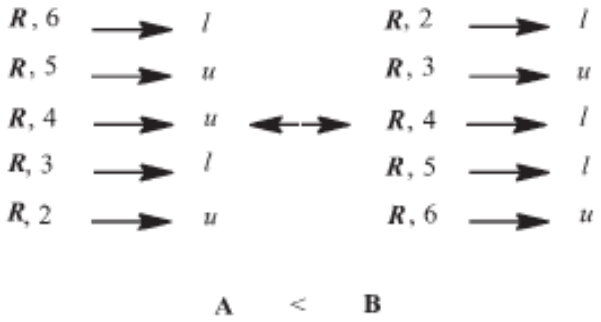
digraf do określenia konfiguracji atomu ‘C-1’
bazujący na numeracji podanej wyżej



deskryptor odniesienia

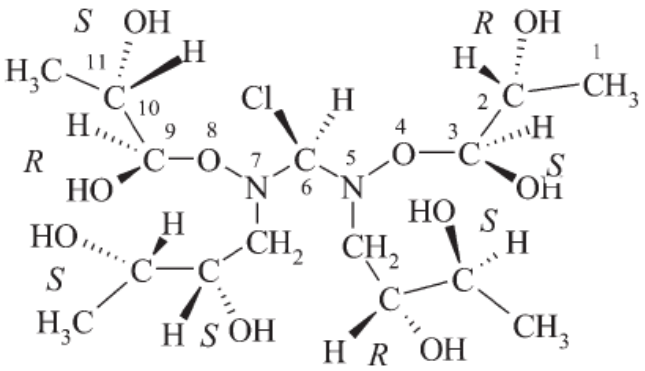
R ***R***

pary deskryptorów

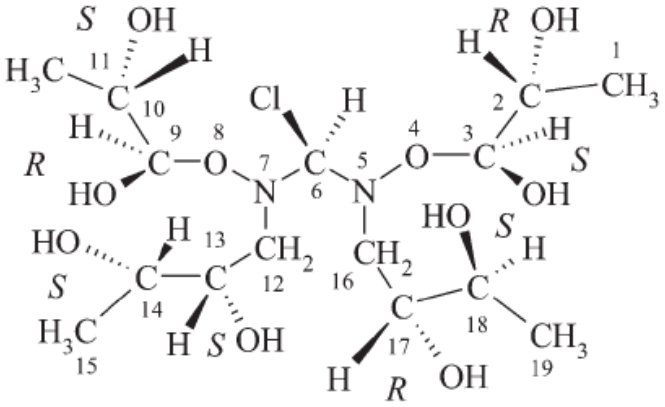


Omówienie: Przykład ten ilustruje użycie deskryptorów odniesienia oraz tych pomocniczych deskryptorow, które stosuje się w miejsce zwykłych stereodeskryptorów *R* i *S*, jak to opisane zostało przez Preloga i Helmchena (patrz. rozdział 6.2.1, odn. 36). Pierwszy etap polega na skonstruowaniu digrafu pokazującego deskryptory pomocnicze (R_0 i S_0). Następnie stosuje się metodologię łączenia deskryptorów w pary opisaną przez Mata i Lobo. W tym przykładzie deskryptory odniesienia wybiera się w oparciu o najwyżej sklasyfikowane węzły w gałęziach A i B: obydwa stereodeskryptory są ‘*R*’. Analiza łączenia deskryptorów w pary prowadzi do stwierdzenia pierwszeństwa gałęzi B przed gałęzią A oraz do przyporządkowania ‘C1’ konfiguracji ‘*R*’.

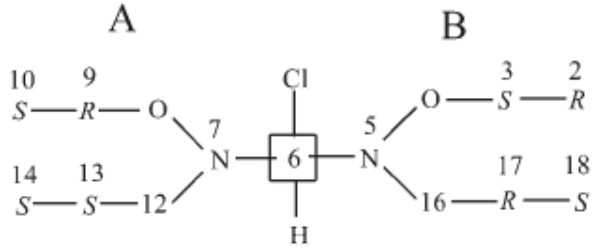
Przykład 4



(2*R*,3*S*,6*R*,9*R*,10*S*)-6-chloro-5-[(2*R*,3*S*)-2,3-dihydroksybutoksy]-7-[(2*S*,3*S*)-2,3-dihydroksybutoksy]-4,8-dioksa-5,7-diazaundekano-2,3,9,10-tetraol (PIN; w łańcuchu głównym nazwanym według nomenklatury zamiennej szkieletu, obie pary stereodeskryptorów są niepodobne wobec czego stereodeskryptor *R* przyporządkowuje się najniższemu możliwemu lokantowi ‘2’)



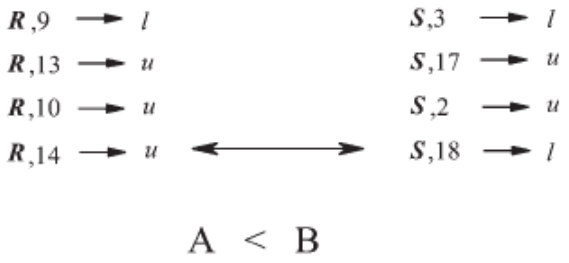
umowna numeracja do konstrukcji digrafu dla centrum ‘C-6’



deskryptor odniesienia

R ***S***

pary deskryptorów

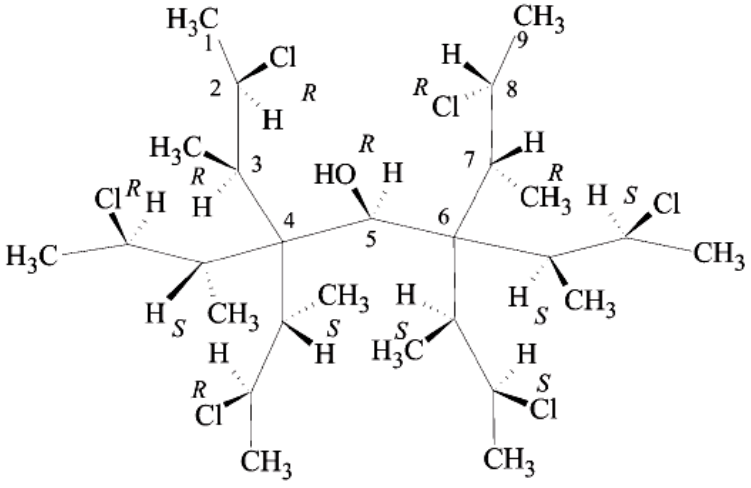


Pierwszeństwo B przed A implikuje dla centrum ‘C-6’ konfigurację ‘*R*’

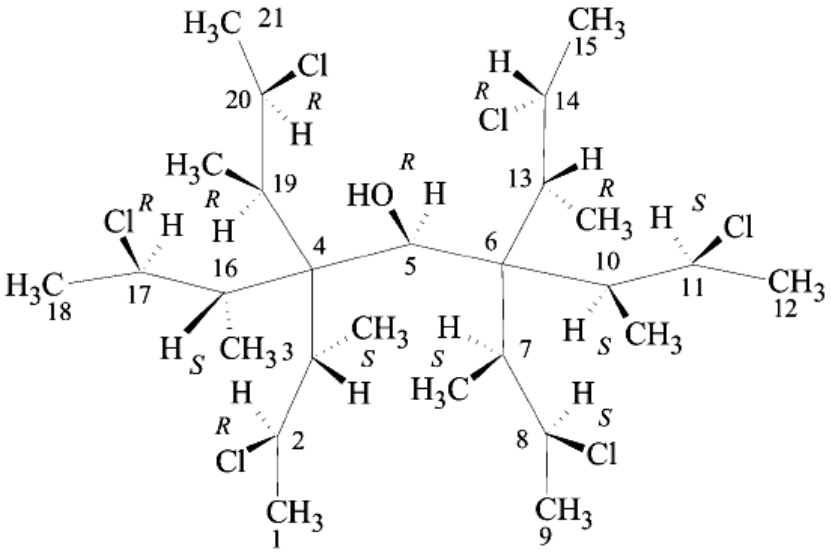
Omówienie: Najpierw numeruje się srukturę tak, jak podano wyżej. Konfigurację centrów; ‘C-2’, ‘C-3’, ‘C-9’, ‘C-10’, ‘C-13’, ‘C-14’, ‘C17’ i ‘C-18’ określa się dokonując rankingu ligandów przy użyciu Reguły Sekwencji **1**. Jednakże reguła ta nie wystarcza, aby określić kolejność dwu ligandów chiralnego centrum ‘C-6’ i dlatego należy porównać pary deskryptorów ich jednostek chiralnych stosując Regułę Sekwencji **4.** Najpierw, w oparciu o Regułę Sekwencji **1** określa się ranking chiralnych centrów w obydwu ligandach atomu ‘C-6’. Dla gałęzi A ranking ten ma postać: ‘C-9’ > ‘C-13’ > ‘C-10’ > ‘C-14’, zaś dla gałęzi B: ‘C-3’ > ‘C-17’ > ‘C-2’ > ‘C-18’. W następnym etapie wybiera się deskryptory odniesienia ‘*R*’ lub ‘*S*’ bazując na deskryptorach powiązanych z najwyżej sklasyfikowanymi w szeregu pierwszeństwa jednostkami chiralnymi obecnymi w obu ligandach. Dla gałęzi A jest to deskryptor ‘*R*’, zaś dla gałęzi B – deskryptor ‘*S*’. Następnie przeprowadza się operację łączenia deskryptorów w pary przy uwzględnieniu sposobu powiązania oraz hierarchii w digrafie . Gdy występuje pierwsza różnica, para *podobna* poprzedza parę *niepodobną*, co decyduje w tym wypadku o pierwszeństwie gałęzi B przed gałęzią A a następnie o przyporządkowaniu centrum ‘C1’ konfiguracji ‘*R*’.

Przykład 5

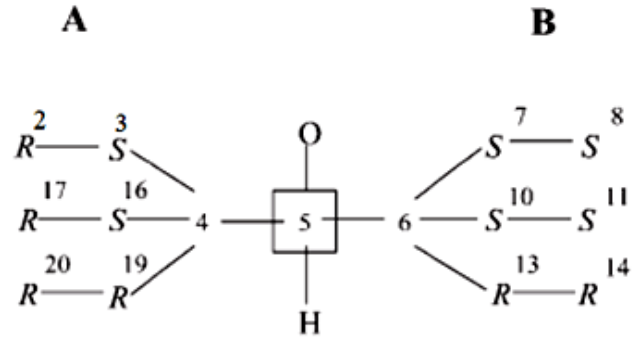
Przykład ten ilustruje zastosowanie kryterium (b) reguły opisanej w P-92.5.2.1



(2*R*,3*R*,5*R*,7*R*,8*R*)-2,8-dichloro-4,4-bis[(2*S*,3*R*)-3-chlorobutan-2-ylo]-6,6-bis[(2*S*,3*S*)-3-chlorobutan-2-ylo]-3,7-dimetylononan-5-ol (PIN; łańcuch główny zawiera dwie pary stereodeskryptorów – jedną *podobną* i jedną *niepodobną*; najniższe lokanty przypisuje się parze podobnej).



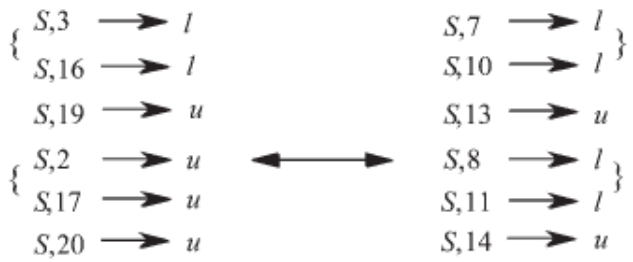
umowna numeracja do konstrukcji digrafu dla centrum ‘C-5’



deskryptory odniesienia

S ***S***

pary deskryptorów



rezultat końcowy

S *lluuuu* ***S*** *lllulu*

A < **B**

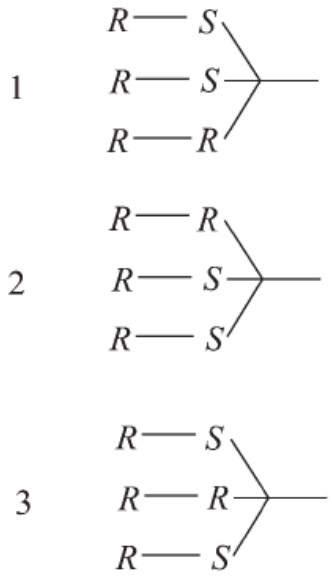
Omówienie: Najpierw numeruje się strukturę tak, jak podano wyżej. Konfigurację centrów; ‘C-2’, ‘C-3’, ‘C-7’, ‘C-8’, ‘C-10’, ‘C-11’, ‘C-13’, ‘C-14’, ‘C-16’, ‘C17’, ‘C-19’ i ‘C-

20' określa się w oparciu o regułę sekwencji **1.** Atomy 'C-4' i 'C-6' stanowią centra achiralne. Określenie konfiguracji centrum 'C-5' zilustrowane jest niżej z wykorzystaniem podanego digrafu. Następnie wybiera się deskryptory odniesienia. Zlokalizowane w II sferze węzły lewej gałęzi są hierarchicznie równoważne; dwa z nich mają konfigurację '*S*', a trzeci - konfigurację '*R*'. Zatem deskryptorem odniesienia jest tu deskryptor '***S***', jako ten, który występuje najczęściej w zbiorze równoważnych najwyżej sklasyfikowanych węzłów. Podobnie stwierdza się, że deskryptorem odniesienia dla gałęzi prawej jest '***S***'.

Hierarchię niezbędną dla porównania par deskryptorów określa się następująco: Po zmianie porządku trzech węzłów w sferze II digrafu (węzły związane z 'C-4' w gałęzi lewej i z 'C-6' w gałęzi prawej) węzły przestają już być równoważne. Te, które tworzą pary *podobne* maja pierwszeństwo przed tymi, które tworzą pary *niepodobne*. Analogicznie, pierwszeństwo par *podobnych* wynika z rankingu w gałęzi B.

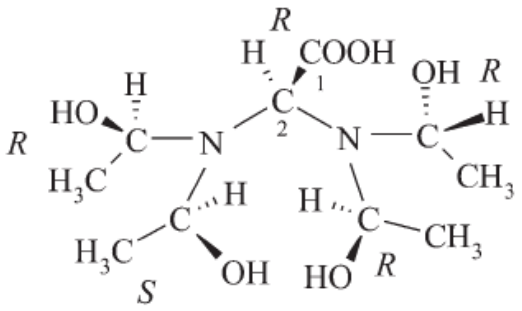
Ta analiza digrafu prowadzi do wniosku, że – w wyniku porównania par przy pierwszej napotkanej różnicy – pary ***S***,8 i ***S***,11 (para *podobne*) ma pierwszeństwo przed parą ***S***,2 i ***S***,17 (para *niepodobne*), co implikuje pierwszeństwo gałęzi B przed gałęzią A i – w konsekwencji – przypisanie centrum 'C-5' konfiguracji '*R*'.

Zmiana porządku w tym digrafie jest zawsze konieczna, gdy stosuje się reguły sekwencji. Przed dokonaniem porównania w oparciu o regułę sekwencji **4b**, wszystkie podane niżej częściowe digrafy 1, 2 i 3 (węzły na szczycie digrafu są równocenne lub mają wyższy ranking niż węzły bliższe spodu digrafu) są tak samo poprawne i każdy z nich może reprezentować gałąź A. Jednak po porównaniu sfery II okazuje się, że tylko digraf 1 reprezentuje hierarchię węzłów.

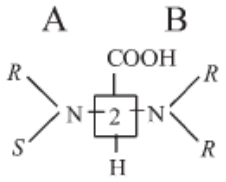


Przykład 6

Przykład ten ilustruje kryterium (i) opisanego w metodologii rekomendowanej przez Matę i Lobo (patrz P-92.5.2.1), które jest następujące: jeżeli zbiór deskryptorów odniesienia jest różny w obu ligandach, wówczas ligand z jednym deskryptorem odniesienia ma pierwszeństwo przed tym, który posiada dwa deskryptory odniesienia.



kwas (2*R*)-2-{bis[(1*R*)-1-hydroksyetylo]amino}-2-{[(1*R*)-1-hydroksyetylo][(1*S*)-1-hydroksyetylo]amino}octowy (PIN)

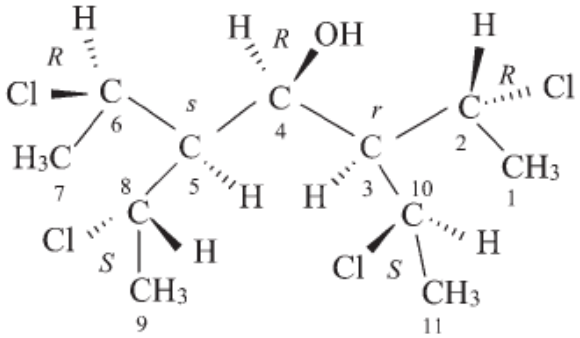


uproszczony digraf do oznaczenia konfiguracji centrum C-2

Omówienie: W gałęzi A, jako deskryptorów odniesienia używa się obydwa deskryptory (‘***R***’ i ‘***S***’); w gałęzi B występuje tylko jeden deskryptor odniesienia (‘***R***’); zatem ligand B ma większe pierwszeństwo, a tym samym centrum ‘C-2’ należy przypisać konfigurację ‘*R*’.

P-92.5.2.3 Reguła sekwencji **4c**: ‘*r*’ poprzedza ‘*s*’

Przykład:

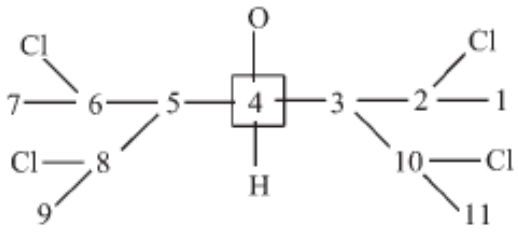


(2*R*,3*r*,4*R*,5*s*,6*R*)-2,6-dichloro-3,5-bis[(1*S*)-1-chlorooetylo]heptan-4-ol (PIN)

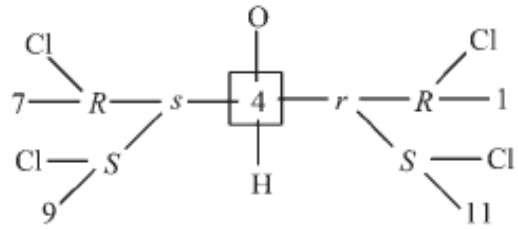
Omówienie: Na podstawie reguły sekwencji **4a**, (b) podanej w P-92.5.2.1 zbiór lokantów ‘(2*R*,4*R*,6*R*)’ ma pierwszeństwo przed zbiorem ‘(2*R*,4*R*,6*S*)’. Zatem pseudoasymetrycznemu centrum ‘*r*’ przypisuje się niższy lokant ‘3’.
[zbiór (2*R*,3*r*,4*R*,5*s*,6*R*) ma pierwszeństwo przed zbiorem (2*R*,3*s*,4*R*,5*r*,6*R*)]

Na podstawie reguły sekwencji **1** centrom ‘C-2’ i ‘C-6’ przypisuje się konfigurację ‘*R*’; z tego samego powodu centrom ‘C-8’ i ‘C-10’ przypisuje się konfigurację ‘*S*’. Konfigurację centrum

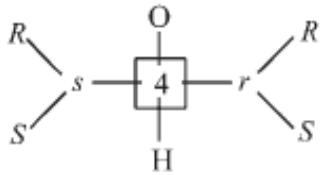
‘C-5’ określa się jako ‘*s*’ w oparciu o regułę sekwencji 5 (patrz niżej, ‘*R*’ poprzedza ‘*S*’); na podstawie tej samej reguły centrum ‘C-3’ przypisuje się konfigurację ‘*r*’. Stosując procedurę opisaną powyżej w rozdziale P-92.5.2.1, konstruuje się następujące uproszczone digrafy:



pierwszy uproszczony digraf



uproszczony digraf z naniesionymi konfiguracjami
centrów chiralnych i pseudoasymetrycznych

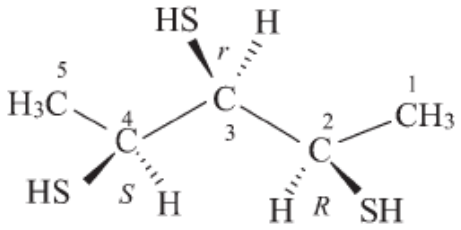


w oparciu o regułę: ‘*r*’ poprzedza ‘*s*’
konfigurację centrum ‘C-4’ określa się jako ‘*R*’

P-92.6 REGUŁA SEKWENCJI **5**: ‘*R*’ poprzedza ‘*S*’, ‘*M*’ poprzedza ‘*P*’ i ‘*seqCis*’ poprzedza ‘*seqTrans*’

W preferowanych nazwach IUPAC pisanych małą literą stereodeskryptorów ‘*r*’ i ‘*s*’ używa się do opisu centrów pseudoasymetrycznych, zaś ‘*m*’ i ‘*p*’ – do opisu pseudosymetrii osiowej (aksjalnej) lub płaszczyznowej (planarnej). Stereodeskryptory te są niezmiennicze względem operacji lustrzanego odbicia. W przeciwieństwie do tego, dwa chiralne ligandy o przeciwnych konfiguracjach zlokalizowane w tej samej pozycji przy wiązaniu podwójnym generują enancjomorficzne (pod względem geometrycznym) wiązania podwójne oznaczane za pomocą stereodeskryptorów ‘*seqCis*’ i ‘*seqTrans*’; takie konfiguracje zmieniają się w wyniku operacji odbicia w lustrze (patrz Przykład 6 podany niżej). Reguła: ‘*seqCis*’ poprzedza ‘*seqTrans*’ omówiona jest w przykładzie 4 w P-93.5.1.4.2.2.

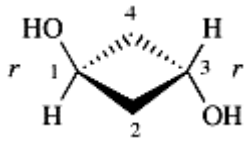
Przykład 1:



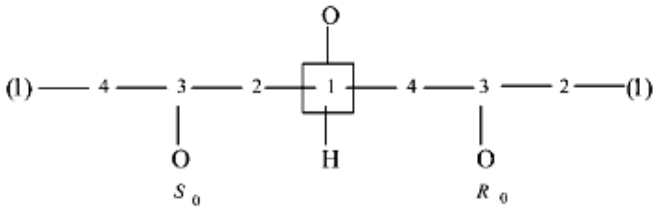
(2*R*,3*r*,4*S*)-pentano-2,3,4-tritiol (PIN)

Omówienie: Konfigurację centrów ‘C-2’ i ‘C-4’ określa się w oparciu o regułę sekwencji **1**. Centrum ‘C-3’ przypisuje się konfigurację ‘*r*’ na podstawie szeregu pierwszeństwa: ‘S > C-2 > C-4 > H’.

Przykład 2:



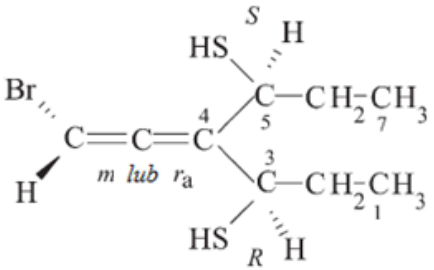
(1*r*,3*r*)-cyklobutano-1,3-diol (PIN)



uproszczony digraf

Omówienie: Powyższy digraf uzasadnia przypisanie centrum ‘C-1’ konfiguracji ‘*r*’ na podstawie reguły: ‘*R*’ poprzedza ‘*S*’. W taki sam sposób określa się konfigurację ‘*r*’ centrum ‘C-3’. W miejsce zwykłych deskryptorów przyporządkowywanych w oparciu o regułę sekwencji **1** (patrz Prelog i Helmchen, podrozdział 6.2.1, odn. 36), używa się deskryptorów pomocniczych ‘R_0’ i ‘S_0’.

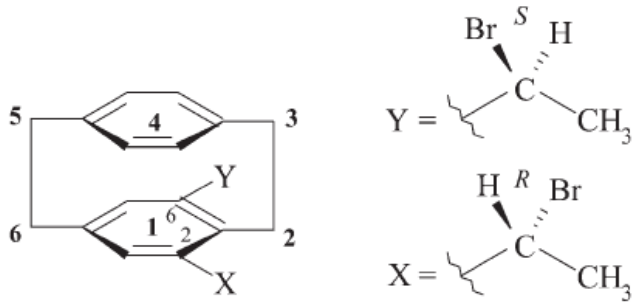
Przykład 3:



(3*R*,4*m*,5*S*)-4-(2-bromoeten-1-ylideno)heptano-3,5-ditiol (PIN)
(3*R*,4r_a,5*S*)-4-(2-bromoeten-1-ylideno)heptano-3,5-ditiol

Omówienie: Konfigurację centrów: ‘C-3’ i ‘C-5’ określa się na podstawie reguły sekwencji **1**. Konfigurację ‘*m*’ lub ‘r_a’ centrum ‘C-4’ określa się w oparciu o metodologię opisaną w rozdziale P-92.1.2.1.2 (patrz także-93.5.7.1).

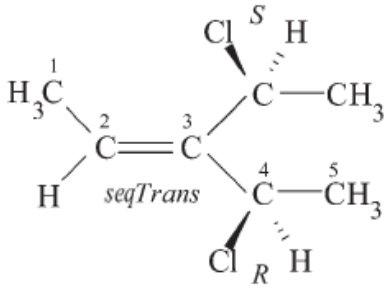
Przykład 4:



(1^1m)-1^2-[(1*R*)-1-bromoetylo]-1^6-[(1*S*)-1-bromoetylo]-1,4(1,4)-dibenzenacykloheksafan (PIN)
(1^1s_p)-1^2-[(1*R*)-1-bromoetylo]-1^6-[(1*S*)-1-bromoetylo]-1,4(1,4)-dibenzenacykloheksafan

Omówienie: Konfigurację ‘X’ i ‘Y’ określa się na podstawie reguły sekwencji **1**. Konfigurację ‘*m*’ lub ‘s_p’ centrum ‘C-1’ określa się w oparciu o metodologię opisaną w rozdziale P-92.1.2.1.3 i P-93.1.2.2.2 (patrz także P-93.5.5.1).

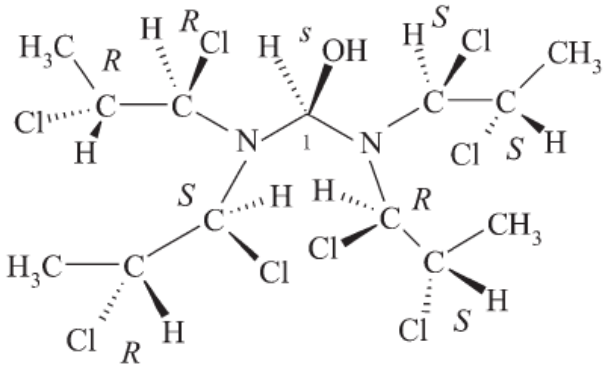
Przykład 5:



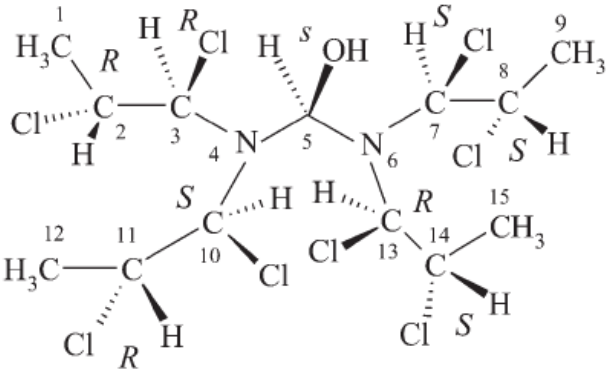
(2*seqTrans*,4*R*)-4-chloro-3-[(1*S*)-chloroetylo]pent-2-en (PIN)

Omówienie: Konfigurację centrum ‘C-3’ i łańcucha bocznego określa się na podstawie reguły sekwencji **1**. Konfigurację ‘*seqTrans*’ określa się w oparciu o metodologię opisaną w rozdziale P-92.4.1 (priorytet określający pierwszeństwo ‘*R*’ przed ‘*S*’ po tej samej stronie płaszczyzny odniesienia).

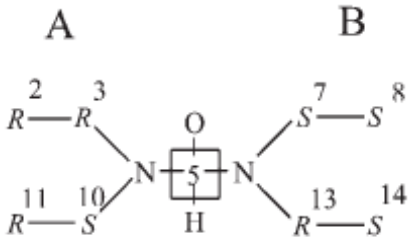
Przykład 6:



(1s)-1-{[(1*R*,2*R*)-1,2-dichloropropylo][(1*S*,2*R*)-1,2-dichloropropylo]amino}-1-{[(1*R*,2*S*)-1,2-dichloropropylo][(1*S*,2*S*)-1,2-dichloropropylo]amino}metan-1-ol (PIN)



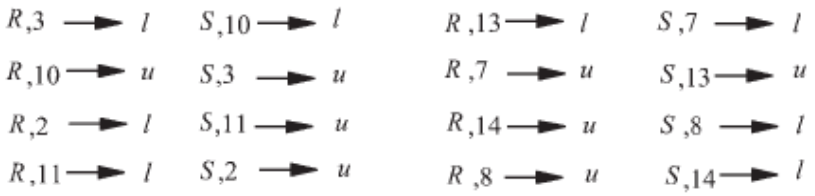
umowna numeracja do konstrukcji digrafu dla centrum 'C-5'



deskryptor odniesienia

R ***S*** ***R*** ***S***

pary deskryptorów



A = B

Omówienie: Cząsteczkę numeruje się najpierw umownie w przedstawiony wyżej sposób. Następnie ligandy analizuje się w oparciu o regułę sekwencji **1** oraz podregułę sekwencji **4b**, przypisując konfigurację ośmiu centrom chiralnym: ‘C-2’, ‘C-3’, ‘C-7’, ‘C-8’, ‘C-10’, ‘C-11’, ‘C-13’, ‘C-14’ jak pokazano wyżej. Aby określić konfigurację centrum ‘C-5’, stosuje się regułę sekwencji **4b**, posługując się powyższym digrafem oraz metodologią opisaną w P-92.5.2.1. Rozstrzygnięcie nie jest tu jednak możliwe, ponieważ uzyskujemy relację: ‘gałąź A’ = ‘gałąź B’, jak to pokazała analiza co z kolei wymusza zastosowanie reguły sekwencji **5.**

Ranking ligandów według reguły sekwencji **5**:

Określenie konfiguracji jest możliwe na podstawie analizy przeprowadzonej na tym samym digrafie przy zastosowaniu reguły sekwencji **5**. Ponieważ w zbiorze węzłów o największym pierwszeństwie (najwyżej sklasyfikowanych) występują obydwa stereodeskryptory ‘*R*’ i ‘*S*’, zatem obydwa z nich muszą być użyte jako deskryptory odniesienia.

Gdy regułę sekwencji **5,** ‘*R* poprzedza *S*’, zastosuje się do pierwszej sfery deskryptorów (to znaczy tych, które są bezpośrednio związane z N), węzeł 3 w ‘gałęzi A’ ma priorytet przed węzłem 10; zaś w ‘gałęzi B’ węzeł 13 ma priorytet przed węzłem 7. Na tym poziomie nie obserwuje się jeszcze żadnej różnicy. Na następnym poziomie, na którym ulokowane są deskryptory ‘2’ i ‘11’ oraz ‘8’ i ‘14’, węzeł 2 w gałęzi A o najwyższej pozycji w rankingu ma konfigurację ‘*R*’, podczas gdy najwyżej lokowany w rankingu w gałęzi B węzeł 8 ma konfigurację ‘*S*’. Jest to zatem pierwsza różnica ustanawiająca pierwszeństwo ‘gałęzi A’ przed ‘gałęzią B’, co pozwala przypisać centrum ‘C-5’ konfigurację ‘*s*’.

Gałąź A	Gałąź B
3-‘*R*’	13-‘*R*’
10-‘*S*’	7-‘*S*’
2-‘*R*’	8-‘*S*’ (pojawia się pierwsza różnica)
11-‘*R*’	14-‘*R*’

Gałąź A > Gałąź B

P-93 OKREŚLANIE KONFIGURACJI

P-93.0 Wprowadzenie
P-93.1 Ogólne aspekty zagadnienia określania konfiguracji
P-93.2 Tetraedryczna konfiguracja pierwiastków innych niż węgiel
P-93.3 Konfiguracja nietetraedryczna
P-93.4 Okre ślanie konfiguracji acyklicznych związków organicznych
P-93.5 Określanie konfiguracji cyklicznych związków organicznych
P-93.6 Związki złożone z łańcuchów i pierścieni

P-93.0 WPROWADZENIE

Metody opisu konfiguracji związków acyklicznych i cyklicznych są odmienne. W P-92 opisane zostały rozmaite stereodeskryptory CIP odpowiadające różnym typom konfiguracji. Niniejszy rozdział omawia te metody a także wybór deskryptorów preferowanych w procesie określania konfiguracji w preferowanych nazwach. Stosowane są one na bazie macierzystych struktur zarówno cyklicznych, jak i acyklicznych wraz ze stereodeskryptorami nie będącymi stereodeskryptorami CIP, zalecanymi w nomenklaturze ogólnej.

P-93.1 OGÓLNE ASPEKTY OKREŚLANIA KONFIGURACJI

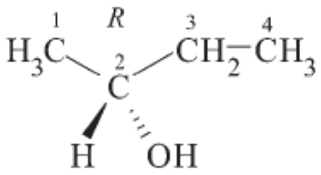
W dziedzinie stereochemii termin ‘konfiguracja’ zastrzeżony jest dla takich przestrzennych uporządkowań atomów indywiduum molekularnego, które można rozróżniać jako ‘stereoizomery’, będące przejawem izomerii nie wiążącej się z różnicami konformacyjnymi. ‘Konformacją’ jest przestrzenne uporządkowanie atomów posiadające cechę różnicowania stereoizomerów, które mogą być przekształcane w siebie nawzajem w wyniku rotacji wokół formalnie pojedynczych wiązań. Konfiguracja omawiane jest w P-93 a konformacja omawiane jest w P-94.

P-93.1.1 Konfiguracja absolutna
P-93.1.2 Konfiguracja względna
P-93.1.3 Racematy
P-93.1.4 Deskryptor ‘*ambo*’

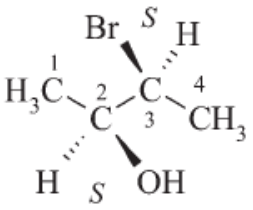
P-93.1.1 Konfiguracja absolutna

‘Konfiguracja absolutna’ jest przestrzennym uporządkowaniem atomów chiralnego indywiduum molekularnego. Odpowiada ona graficznej reprezentacji i opisywana jest takimi stereodeskryptorami jak: ‘*R*’, ‘*S*’, ‘*r*’, ‘*s*’, ‘*M*’ lub ‘*P*’ omówionymi w rozdziale P-92.

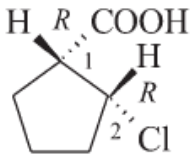
Przykłady



(2*R*)-butan-2-ol (PIN)



(2*S*,3*S*)-3-bromobutan-2-ol (PIN)

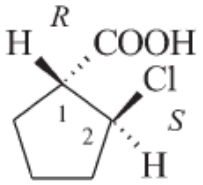


kwas (1*R*,2*R*)-2-chlorocyklopentano-1-karboksylowy (PIN)

P-93.1.2 Konfiguracja względna

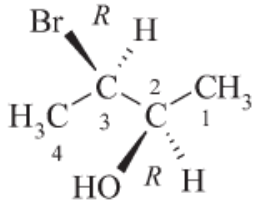
P-93.1.2.1 'Konfiguracja względna' jest to konfiguracja dowolnej jednostki stereogenicznej (asymetrycznej) w odniesieniu do innej jednostki stereogenicznej zawartej w tym samym indywiduum molekularnym. Względna konfiguracja opisująca diastereoizomery może być oznaczana przy użyciu przedrostka 'rel' umieszczonego na początku nazwy jednego z enancjomerów, zawierającej stereodeskryptory '*R*', '*S*', '*M*', '*P*' itp. Przedrostek '*rel*' połączony ze zwykłymi stereodeskryptorami jest preferowany przy tworzeniu preferowanych nazw IUPAC w stosunku do stereodeskryptorów z gwiazdką: '*R**', '*S**', '*M**', '*P**' itd., używanych w nomenklaturze ogólnej. Należy podkreślić, że przedrostek '*rel*' wskazuje na konfigurację całej cząsteczki. Struktura enancjomeru z następczą wzmianką: 'lub enancjomer' używana jest w celu zilustrowania konfiguracji względnej. Gdy opisuje się względną konfigurację, stereodeskryptor taki, jak '*R*' lub '*R**' umieszcza się przed centrum stereogenicznym posiadającym najmniejszy lokant.

Przykłady:



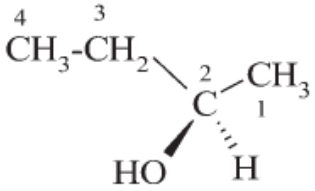
lub enancjomer

kwas *rel*-(1*R*,2*S*)-2-chlorocyklopentano-1-karboksylowy (PIN)
kwas (1*R**,2*S**)-2-chlorocyklopentano-1-karboksylowy
kwas *trans*-2-chlorocyklopentano-1-karboksylowy (używanie nie będącego stereodeskryptorem CIP stereodeskryptora '*trans*' patrz P-93.5.1.2)
[nie: kwas *rel*-(1*S*,2*R*)-2-chlorocyklopentano-1-karboksylowy]
[nie: kwas (1*S**,2*R**)-2-chlorocyklopentano-1-karboksylowy]



lub enancjomer

rel-(2*R*,3*R*)-3-bromobutan-2-ol (PIN)
(2*R**,3*R**)-3-bromobutan-2-ol

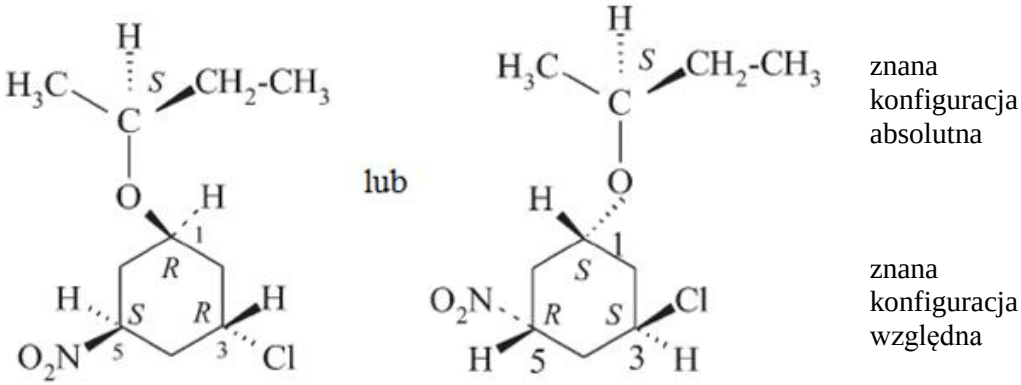


lub enancjomer

rel-(2*R*)-butan-2-ol (PIN)
(2*R**)-butan-2-ol

P-93.1.2.2 W związkach zawierających centra chiralne o znanej konfiguracji absolutnej oraz nieokreślony sterycznie zbiór centrów chiralnych o znanej konfiguracji względnej, trzeba użyć deskryptorów '*R**' i '*S**', aby ten drugi doprecyzować. Nie można użyć prefiksu '*rel*', ponieważ stosuje się go do całej cząsteczki.

Przykład:



znana konfiguracja absolutna

znana konfiguracja względna

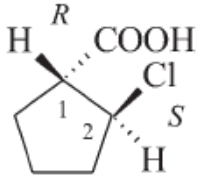
(1*R**,3*R**,5*S**)-1-{[(2*S*)-butan-2-yl]oksy}-3-chloro-5-nitrocykloheksan (PIN)

P-93.1.3 Racematy

Racemat jest równomolową mieszaniną pary enancjomerów. Nie wykazuje ona czynności optycznej. Racematy można oznaczać używając przedrostka '*rac*' umieszczając go z przodu nazwy jednego z enancjomerów zawierającej deskryptory '*R*', '*S*', '*M*', '*P*', itp. Ten przedrostek '*rac*' ze zwykłymi stereodeskryptorami jest preferowany w preferowanych nazwach IUPAC w stosunku do takich stereodeskryptorów, jak '*RS*', '*SR*' itd., używanych w nomenklaturze ogólnej. Należy podkreślić, że prefiks '*rac*' dotyczy konfiguracji całej cząsteczki.

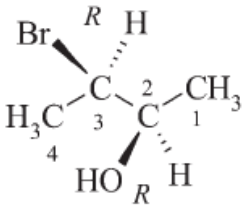
Do odzwierciedlenia racematów używa się wzoru jednego z enancjomerów dodając za nim wzmiankę: 'i enancjomer'. Gdy opisuje się racemat, stereodeskryptory takie, jak '*R*' i '*RS*' umieszcza się przy centrum o najmniejszym lokancie.

Przykłady:



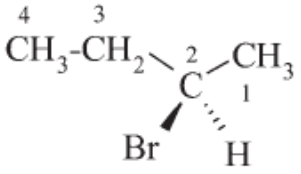
i enancjomer

kwas *rac*-(1*R*,2*S*)-2-chlorocyklopentano-1-karboksylowy (PIN)
kwas (1*RS*,2*SR*)-2-chlorocyklopentano-1-karboksylowy



i enancjomer

rac-(2*R*,3*R*)-3-bromobutan-2-ol (PIN)
(2*RS*,3*RS*)-3-bromobutan-2-ol



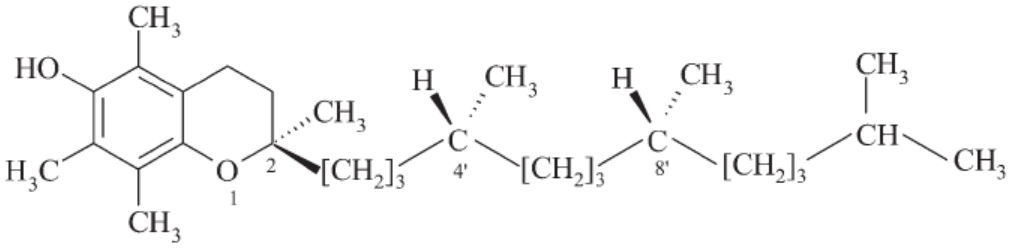
i enancjomer

rac-(2*R*)-2-bromobutan (PIN)
(2*RS*)-2-bromobutan
(±)-2-bromobutan

P-93.1.4 Deskryptor '*ambo*'

W procesie otrzymywania diastereoizomerów poprzez reakcję niestereogenicznych centrów chiralnej cząsteczki lub reakcję związku chiralnego ze związkiem racemicznym nie uzyskuje się na ogół mieszaniny 50:50. Aby zaznaczyć taką sytuację stosuje się prefiks '*ambo*' (patrz rozdział P-103.3.4)

Przykłady:



plus domieszka epimeru na centrum 'C-2'

2-*ambo*-(2*R*,4'*R*,8'*R*)-α-tokoferol (odn. 27, 37, 44)

2-*ambo*-(2*R*)-2,5,7,8-tetrametylo-2-[(4*R*,8*R*)-4,8,12-trimetylotridecylo]-3,4-dihydro-2*H*-1-benzopiran-6-ol (PIN)

P-93.2 TETRAEDRYCZNA KONFIGURACJA ATOMÓW INNYCH NIŻ ATOM WĘGLA

P-93.2.0 Wstęp
P-93.2.1 Metodologia ogólna
P-93.2.2 Sole azanium (amonium) i fosfanium (fosfonium)
P-93.2.3 Oksydy (tlenki) amin i oksydy (tlenki) fosfin
P-93.2.4 Fosforany, fosfoniany i ich pochodne
P-93.2.5 Siarczany, sulfoniany i ich pochodne
P-93.2.6 Związki grupy 14 (inne niż związki węgla)

P-93.2.0 Wprowadzenie

System pierwszeństwa CIP opisany dla stereogenicznych centrów węglowych został rozszerzony na dowolne atomy mające cztery ligandy usytuowane tetraedrycznie. W rozdziale tym fakt ten zilustrowany został licznymi przykładami.

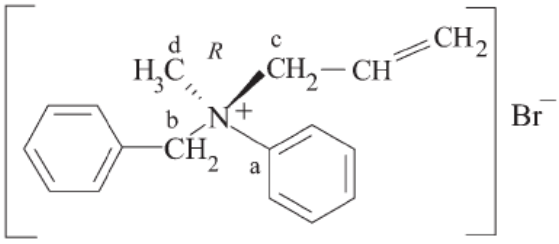
P-93.2.1 Ogólna metodologia

Konfigurację absolutną dowolnego centrum chiralnego z czterema ligandami usytuowanymi tetraedrycznie opisuje się przy użyciu stereodeskryptorów '*R*' i '*S*'; konfigurację absolutną centrów pseudoasymetrycznych opisuje się stereodeskryptorami; '*r*' i '*s*'. Rola tych deskryptorów w nazwie jest taka sama, jak w przypadku związków węgla. Przed stereodeskryptorami umieszcza się lokanty cyfrowe, natomiast nie umieszcza się lokantów literowych takich jak '*N*', '*O*' lub '*S*'. Aby uniknąć niejednoznaczności w preferowanych nazwach IUPAC, w przypadku braku w nazwie jakiegoś lokantu odniesienia, nazwę związku zawierającego jednostkę stereogeniczną, której centralnym atomem jest B, Al, Ga, In, Tl, S, Se, Te, N, P, As, Sb, Bi zapisuje się w odpowiednich dodatkowych nawiasach. W nomenklaturze ogólnej lokanty literowe i dodatkowe nawiasy można pominąć.

P-93.2.2 Sole azaniowe (amoniowe) i fosfaniowe (fosfonowe)

Cztery różne ligandy rozpatruje się w kolejności pierwszeństwa: 'a' > 'b' > 'c' > 'd' w sposób opisany w P-92.2. Stereodeskryptory umieszcza się w sposób opisany w P-91.2.

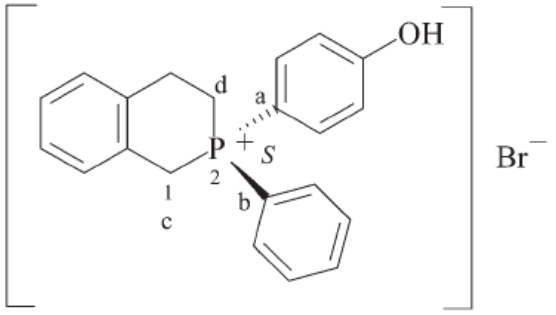
Przykłady:



bromek (*R*)-[*N*-benzylo-*N*-metylo-*N*-(prop-2-en-1-ylo)anilinium] (PIN)
bromek (*R*)-[*N*-benzylo-*N*-metylo-*N*-(prop-2-en-1-ylo)benzenoaminium]

bromek (*R*)-[benzylo(fenylo)metylo(prop-2-en-1-ylo)azanium]

bromek (*R*)-[benzylo(fenylo)metylo(prop-2-en-1-ylo)amonium]



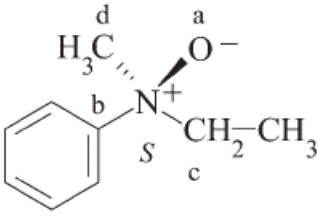
bromek (2*S*)-2-fenylo-2-(4-hydroksyfenylo)-1,2,3,4-tetrahydroizofosfinolin-2-ium (PIN)

Sole arsanium, stybanium i bizmutanium traktuje się tak samo, jak kationy zawierające centra fosforowe.

P-93.2.3 Oksydy (tlenki) amin i oksydy (tlenki) fosfin

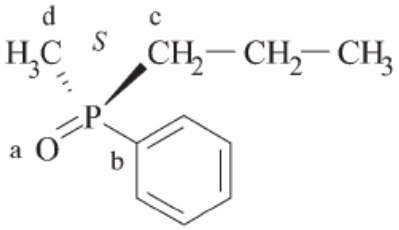
W chiralnych oksydach amin i oksydach fosfin atom tlenu traktuje się jak czwarty atom. Natura wiązania z tym atomem tlenu nie ma w tym wypadku znaczenia.

Przykłady:



N-oksyd (*S*)-*N*-etylo-*N*-metyloaniliny (PIN; patrz P-74.2.1.2)

(*S*)-(*N*-etylo-*N*-metyloaniliniumylo)oksydanid



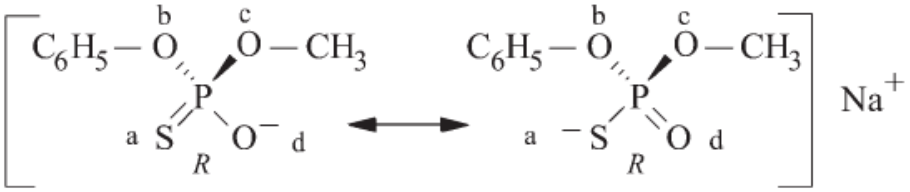
(S)-fenylo(metylo)propylo-λ^5-fosfanon (PIN; patrz P-74.2.1.4)

oksyd (*S*)-fenylo(metylo)propylofosfanu

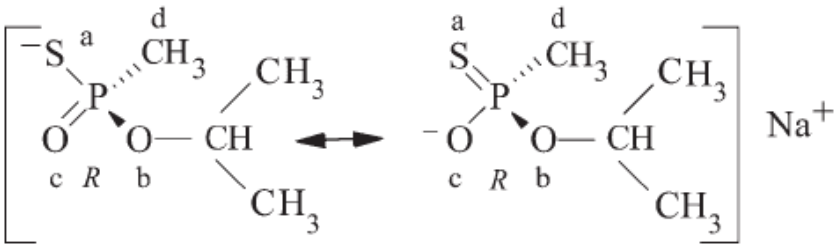
P-93.2.4 Fosforany, fosfoniany i ich pochodne

Wiązanie ‘P=O’, tak konwencjonalnie zapisywane w fosforanach, fosfonianach i ich pochodnych, rozpatruje się jako wiązanie pojedyncze, ponieważ w konfiguracji tetraedrycznej mogą wystąpić tylko cztery ligandy (atomy lub grupy). Podobnie, przy ustalaniu konfiguracji chiralnej cząsteczki, nie rozpatruje się formalnego rozmieszczenia ładunków. Ponieważ stereodeskryptory ‘*R*’ i ‘*S*’ opisują całą strukturę (zarówno sól jak i ester), więc aby określić globalną konfigurację, pełną nazwę umieszcza się w nawiasie.

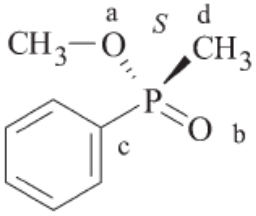
Przykłady:



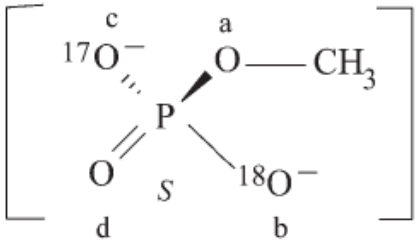
(*R*)-(fosforotian *O*-fenylu-*O*-metylu)-sodu (PIN)



(*R*)-(metylofosfonotian *O*-propan-2-ylu)-sodu (PIN)
(*R*)-[metylofosfonotian *O*-(1-metyloetylu)]-sodu



(*S*)-[(fenylo)(metylo)fosfinian) metylu (PIN)

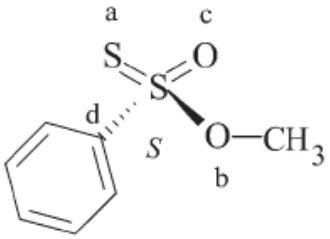


(*S*)-[*O*-metylo(^{17}O,^{18}O)fosforan] diwodoru (PIN)

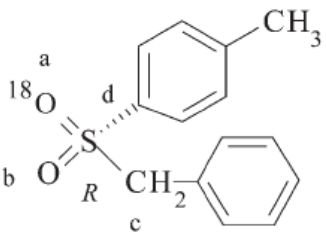
P-93.2.5 Siarczany, sulfoniany i ich pochodne

Siarczany, sulfoniany i pokrewne aniony traktuje się w taki sam sposób, jak aniony fosforanowe (patrz P-93.2.4). Seleniany, selenoniany tellurany, telluroniany i ich pochodne traktuje się analogicznie, jak siarczany, sulfoniany oraz ich pochodne. Sulfotlenki omawia się w P-93.3.3.3.

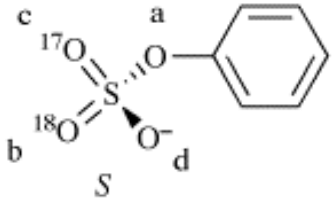
Przykłady:



(*S*)-benzenosulfotian *O*-metylu (PIN)



4-{(*R*)-fenylo[($^{18}O_1$)metanosulfonylo]}-1-metylobenzen (PIN)



$(CH_3\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}CH_2)_4N^+$

(*S*)-[*O*-fenylo(^{17}O,^{18}O)siarczan] *N*,*N*,*N*-tributylobutano-1-aminium (PIN)

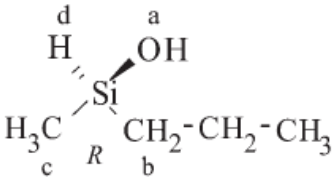
(*S*)-[*O*-fenylo(^{17}O,^{18}O)siarczan] tetrabutyloamonium

(*S*)-[*O*-fenylo(^{17}O,^{18}O)siarczan] tetrabutyloazanium

P-93.2.6 Związki grupy 14 (inne niż związki węgla)

Chiralne silany, germanany, stanniany i plumbany traktuje się w taki sam sposób, jak związki węgla.

Przykład:



(*R*)-metylo(propylo)silanol (PIN)

P-93.3 KONFIGURACJA NIETETRAEDRYCZNA

P-93.3.1 Metodologia ogólna
P-93.3.2 Symbole poliedralne
P-93.3.3 Indeks konfiguracji i liczba pierwszeństwa
P-93.3.4 Symbole chiralności

P-93.3.1 Metodologia ogólna

W sytuacji, gdy atom jest połączony z trzema, czterema, pięcioma lub sześcioma ligandami (atomami lub grupami), możliwe są liczne konfiguracje geometryczne. Na ogół występuje odchylenie od idealnej geometrii regularnego ciała stałego ze względu na różnice między

związanymi atomami. Tak więc pięć dołączonych ligandów może być ułożone w formie bipiramidy trygonalnej lub piramidy kwadratowej, a sześć ligandów – w formie oktaedru lub pryzmy trygonalnej (spotykanej znacznie rzadziej). Omawiana niżej notacja tych układów opisana jest w regułach IUPAC nomenklatury koordynacyjnych związków nieorganicznych (IR-9.3, odn.12). Szczegóły na temat geometrii układów o liczbie koordynacyjnej większej niż sześć można również znaleźć w odn. 12.

Stereodeskryptory dla konfiguracji nietetraedrycznych składają się z trzech części:

(1) Symbol opisujący ogólną konfigurację zwany ‘symbolem poliedralnym’;

(2) Symbol zwany ‘indeksem konfiguracji’, opisujący konfigurację ligandów wokół atomu centralnego;

(3) Symbol opisujący ‘konfigurację absolutną’ związany z atomem centralnym i zwany ‘symbolem chiralności’.

Te trzy części stereodeskryptora zapisuje się w jednym nawiasie, rozdziela myślnikami, umieszcza na początku nazwy i oddziela się je od niej myślnikiem.

P-93.3.2 Symbole poliedralne

Symbol polideralny przyjmuje postać skrótu nazwy najbardziej zbliżonej wyidealizowanej geometrii (duże litery pisane kursywą) i liczby wskazującej liczbę przyłączonych ligandów (patrz Reguła IR-9.3.2.1, odn. 12). Symbole najczęściej spotykanych poliedrów (wielościanów) stanowiących organiczne jednostki strukturalne podane są w Tabeli 9.1. Konfiguracja cząsteczek zawierających centrum tetraedryczne omówiona została w P-92.

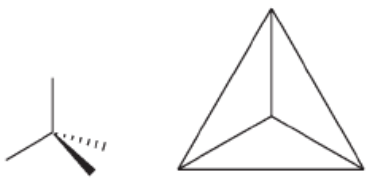
Jeżeli nie ma potrzeby podawania dalszych informacji, skrót nazwy wyidealizowanej geometrii oraz liczbę skoordynowanych atomów lub grup rozdziela się myślnikiem, zamyka w nawiasie i umieszcza na początku nazwy związku.

Tabela 9.1. Zwykle spotykane symbole poliedryczne w związkach organicznych

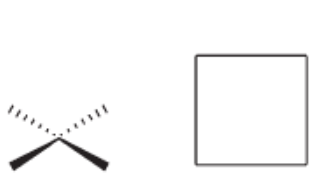
Wyidealizowana geometria	**Liczba skoordynowanych atomów lub grup**	**Symbol poliedralny**
piramida trygonalna	3	*TPY-3*
kształt litery T	3	*TS-3* [poz. (2)]
tetraedr	4	*T-4*
kwadratowa płaska	4	*SP-4*
huśtawka	4	*SS*-4 (odn. 12)
bipiramida trygonalna	5	*TBPY-5*
piramida kwadratowa	5	*SPY-5*
oktaedr	6	*OC-6*

TPY-3

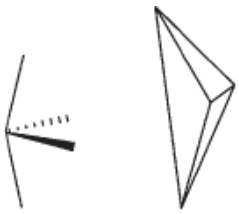
TS-3



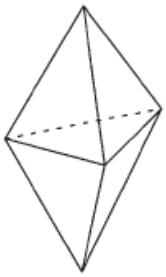
T-4



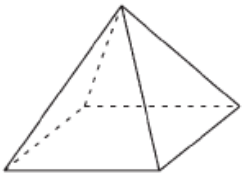
SP-4



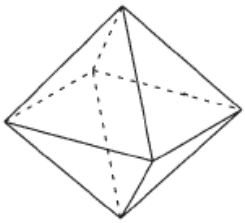
SS-4



TBPY-5

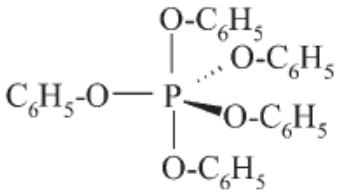


SPY-5

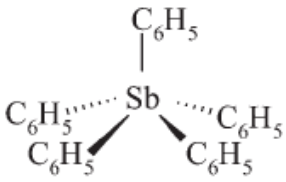


OC-6

Przykłady:



(*TBPY*-5)-pentafenoksy-λ^5-fosfan (PIN)



(*SPY*-5)-pentafenylo-λ^5-stilban (PIN)

P-93.3.3 Indeks konfiguracji i reguły pierwszeństwa

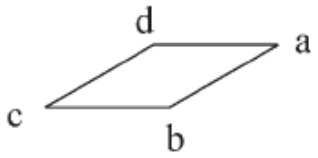
P-93.3.3.1 Ogólna metodologia
P-93.3.3.2 Piramida trygonalna

P-93.3.3.3 Układy o kształcie litery T
P-93.3.3.4 Układy huśtawki
P-93.3.3.5 Bipiramida trygonalna
P-93.3.3.6 Piramida kwadratowa
P-93.3.3.7 Oktaedr

P-93.3.3.1 Ogólna metodologia

Indeks konfiguracji jest ciągiem cyfr informujących o lokalizacji każdego atomu lub grupy (patrz reguła IR-9.3.3.2, odn. 12). Opiera się on na priorytecie CIP (patrz P-92) przyłączonych atomów. Atom (lub atomy) o największym pierwszeństwie otrzymuje pierwszeństwo '1'; następny – pierwszeństwo '2', itd. W podanych niżej przykładach struktury opisane są za pomocą lokantów. W opisie używa się też obwiedzionych kółkiem liczb, które oznaczają pierwszeństwo według priorytetu CIP. Do standardowych reguł sekwencji **1** i **2** niezbędne jest dołączenie trzech dodatkowych:

(a) '*trans*-maksymalna- różnica' pierwszeństwa (patrz IR-9.3.3.3, odn. 12). Wśród atomów o tym samym pierwszeństwie, większe pierwszeństwo przypisuje się temu atomowi, który jest w pozycji *trans* (po przeciwnej stronie) w stosunku do atomu o najmniejszym pierwszeństwie. W poniższej strukturze planarnej 'a' i 'c' (oraz 'b' i 'd') są w pozycji *trans*.



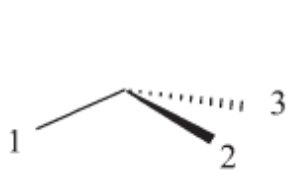
(b) Konwencja primowania (patrz IR-9.3.3.3, odn. 12). Gdy występują dwa (lub trzy) identyczne pierścienie, primuje się w jednym z nich liczby oznaczające pierwszeństwo (a w trzecim – podwójnie promuje).

(c) Nieprimowane liczby pierwszeństwa mają pierwszeństwo przed primowanymi. W koordynacyjnej nomenklaturze pierścienie są ligandami didentnymi i polidentnymi.

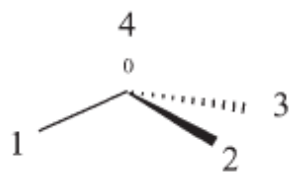
Każda wyidealizowana geometria ma swoje własne reguły porządkowania indeksów konfiguracji.

P-93.3.3.2 Piramida trygonalna

Konfigurację cząsteczek zawierających centrum o budowie piramidy trygonalnej (*TPY*-3) opisuje się w sposób podobny do centrum tetraedrycznego (*T*-4) opisane wyżej w P-92 (patrz IR-9.3.4.3, odn. 12). Konfigurację tetraedryczną uzyskuje się poprzez dodanie atomu fantomalnego (0) do atomu centralnego prostopadle do podstawy piramidy. Do symbolu 'TPY-*3*' nie dodaje się żadnego indeksu konfiguracji. Liczby pierwszeństwa są następujące: '1 > 2 > 3 > 4'.



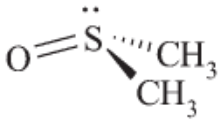
TPY-3



(*T*-4) (pokazano atom fantomalny '0')

Tradycyjnie, sulfotlenki postrzega się jako układ tetraedryczny złożony z atomu centralnego, ligandów i wolnej pary elektronów (lub atomu fantomalnego). Nie używa się tu żadnego symbolu poliedralnego.

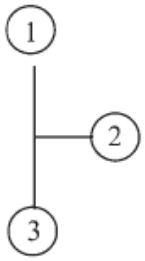
Przykład:



(metanosulfinylo)metan (PIN)
[nie (*T*-4)-(metanosulfinylo)metan;
w nazwach związków organicznych
nie używa się symbolu (*T*-4)]

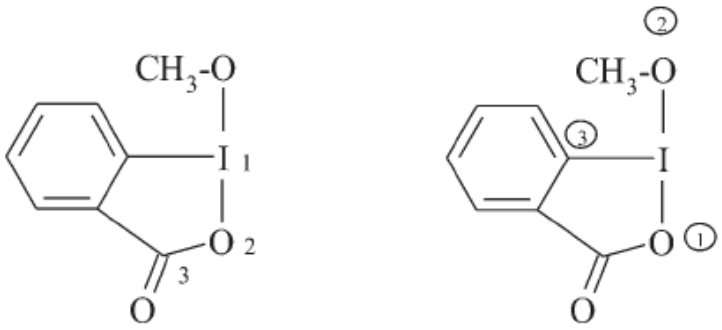
P-93.3.3.3 Układy o kształcie litery T

Indeks konfiguracji dla konfiguracji o kształcie litery T następuje po symbolu poliedralnym *TS*-3 i składa się z pojedynczej cyfry będącej liczbą określającą kolejność w szeregu pierwszeństwa atomu lub podstawnika znajdującego się w podstawie litery ‘T’ (w przeciwieństwie do daszka litery T) [patrz IR-9.3.3.7, poz. (12)] .



(*TS*-3-2)

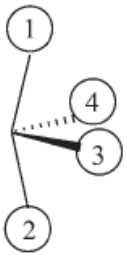
Przykład:



(*TS*-3-3)-1-metoksy-1λ^3,2-benzojodoksol-3(1*H*)-on (PIN)
[nie TBPY-3)-1 λ^3,2-benzojodoksol-3(1*H*)-on; patrz P-93.3.3.5.1]

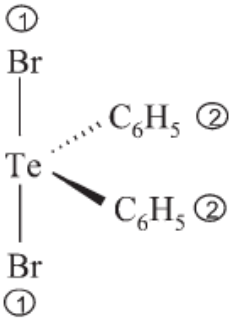
P-93.3.3.4 Układy huśtawki

Indeks konfiguracji dla układu huśtawki składa się z liczb pierwszeństwa wskazujących dwa atomy lub grupy oddzielone największym kątem (patrz IR-9.3.3.8, odn. 12).



(*SS*-4-12)

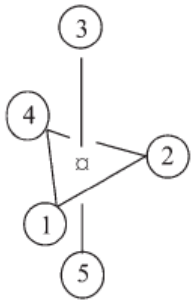
Przykład:



(*SS*-4-11)-dibromodifenylo-λ^3-telluran (PIN)
[nie *TBPY*-4- dibromodifenylo-λ^3-telluran (patrz P-93.3.3.5.1)]

P-93.3.3.5 Bipiramida trygonalna

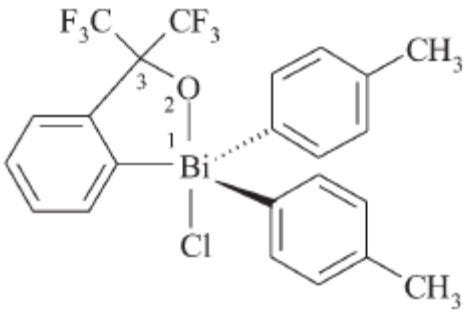
P-93.3.3.5.1 Indeks konfiguracji bipiramidy trygonalnej (patrz IR-9.3.3.6, odn. 12) składa się z liczb pierwszeństwa dwu apikalnych atomów (jeżeli są one różne podaje się najpierw niższą liczbę) stanowiących oś odniesienia układu. Liczby pierwszeństwa są następujące: '1 > 2 > 3 > 4 > 5'.



TBPY-5-35

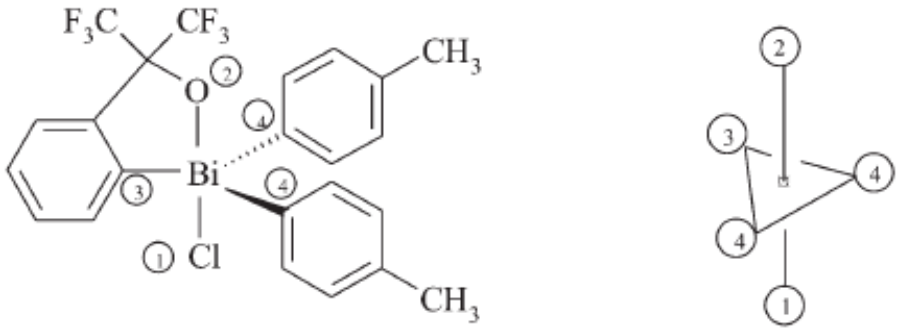
Symbol poliedralny i indeks konfiguracji rozdziela się myślnikiem, zamyka w nawiasie i umieszcza na początku nazwy związku, o ile nie ma potrzeby podawania dodatkowej informacji.

Przykład:



(*TBPY*-5-12)-1-chloro-1,1-bis(4-metylofenylo)-3,3-bis(trifluorometylo)-1,3-dihydro-2,1λ^5-benzoksabizmol (PIN)

Wyjaśnienie:

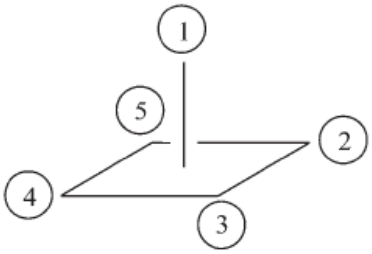


P-93.3.3.5.2 Układ bipiramidy trygonalnej rozszerza się na atomy centralne podstawione czterema ligandami i mające jedną wolną parę elektronów oraz na atomy podstawione trzema ligandami i mające dwie wolne pary elektronów (patrz SP-9.2, odn. 12).

Gdy na atomie centralnym obecna jest jedna wolna para elektronów, symbolem poliedralnym jest '*TBPY*-4'; gdy zaś dwie wolne pary – symbolem jest '*TBPY*-3'. Ten system nie jest tu jednak zalecany. Zamiast tego w preferowanych nazwach IUPAC w miejsce symbolu '*TBPY*-4', dla układów huśtawki używa się symbolu poliedralnego '*SS*' (patrz 93.3.3.4) i podobnie – dla układów o kształcie litery T zamiast symbolu '*TBPY*-3' używa się symbolu poliedralnego '*TS*-3' (patrz P-93.3.3.3).

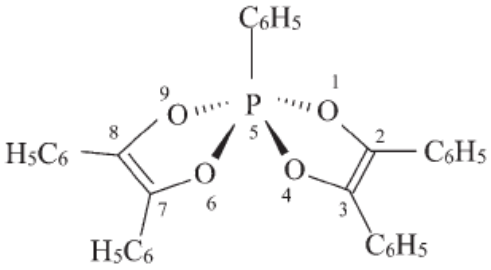
P-93.3.3.6 Piramida kwadratowa

Indeks konfiguracji dla piramidy kwadratowej (patrz reguła IR-9.3.3.5, odn. 12) określa się przy użyciu dwóch liczb. Pierwsza z nich jest liczbą pierwszeństwa atomu apikalnego a druga – liczbą pierwszeństwa atomu będącego w pozycji *trans* (naprzeciw) w stosunku do atomu o największym pierwszeństwie (najmniejsza liczba pierwszeństwa) wśród atomów tworzących podstawę piramidy. W razie potrzeby stosuję się regułę '*trans*-maksimum różnicy' liczb pierwszeństwa (patrz IR-9.3.3.3, odn. 12). Oś odniesienia odpowiada wiązaniu z ligandem apikalnym. Symbol poliedralny i indeks konfiguracji rozdziela się myślnikiem, zamyka w nawiasie i umieszcza za początku nazwy związku - o ile dalsze informacje nie są tu niezbędne. Przy zadanym porządku pierwszeństwa: '1 > 2 > 3 > 4 > 5', poniższą konfigurację opisuje się indeksem konfiguracji '14'.



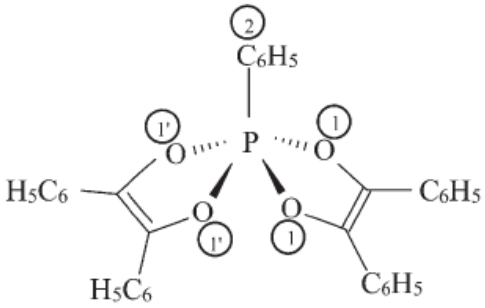
SPY-5-14

Przykład 1:

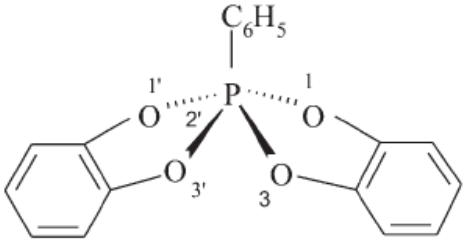


(*SPY*-5-21’)-2,3,5,7,8-pentafenylo-1,4,6,9-tetraoksa-5λ^5-fosfaspiro[4,4]nona-2,7-dien (PIN)

Wyjaśnienie:

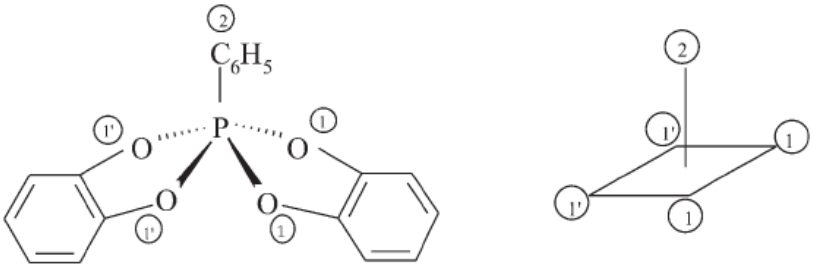


Przykład 2:

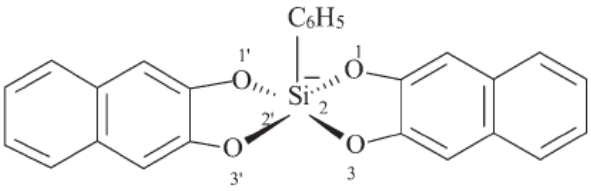


(*SPY*-5-21′)-2-fenylo-2*H*-2λ^5,2′-spirobi[[1,3,2]benzodioksafosfol] (PIN)

Wyjaśnienie:

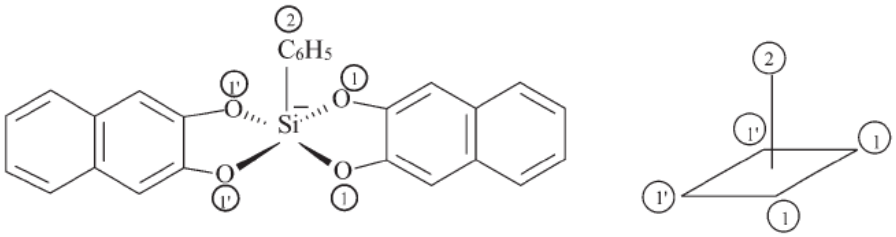


Przykład 3:



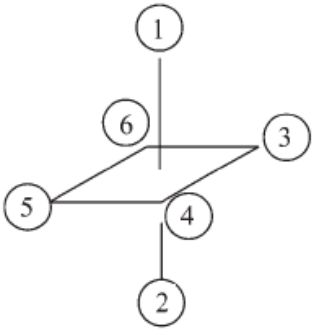
(SPY-5-21′)-2-fenylo-2*H*-2,2′-spirobi{nafto[2,3d][1,3,2]dioksasilol}-2-uid (PIN)

Wyjaśnienie:



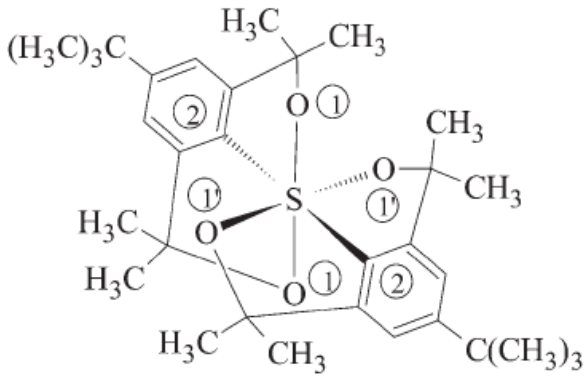
P-93.3.3.7 Oktaedr

Indeks konfiguracji dla oktaedru (patrz reguła IR-9.3.3.4, odn. 12) określa się przy użyciu dwóch liczb. Pierwsza z nich to liczba pierwszeństwa atomu ‘*trans*’ (naprzeciw) w stosunku do atomu o największym pierwszeństwie (najmniejsza liczba pierwszeństwa). To definiuje oś odniesienia. Druga z nich to liczba pierwszeństwa atomu ‘*trans*’ (naprzeciw) w stosunku do atomu o największym pierwszeństwie (najmniejsza liczba pierwszeństwa) w płaszczyźnie prostopadłej do osi odniesienia. Jeżeli jest to konieczne, stosuje się zasadę ‘*trans*-maksimum-różnicy’ liczb pierwszeństwa. Symbol poliedralny i indeks konfiguracji rozdziela się myślnikiem, zamyka w nawiasie i umieszcza za początku nazwy związku - o ile żadne dalsze informacje nie są tu niezbędne). Dla porządku pierwszeństwa: ‘1 > 2 > 3 > 4 > 5 > 6’, indeks konfiguracji wynosi ‘25’, jak podano niżej.



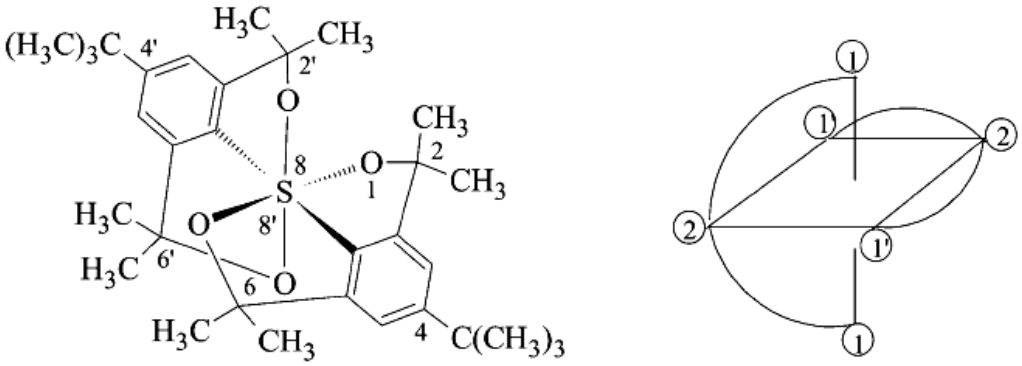
(*OC*-6-25)

Przykład:



(*OC*-6-11′)-4,4′-di-*tert*-butylo-2,2,2′2′,6,6,6′,6′-oktametylo-2*H*,2′*H*,6*H*,6*H*′-8λ^{6-},8′-spirobi{[1,2]oksatiolo[4,3,2-*hi*][2,1]benzoksatiol} (PIN)

Wyjaśnienie:



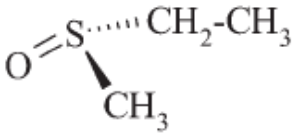
P-93.3.4 Symbole chiralności

Konfigurację absolutną związków opisywanych przy pomocy symbolu poliedralnego i indeksu konfiguracji określa się przy użyciu symboli ‘*A*’ i ‘*C*’. Wyjątki stanowią: trygonalna piramida, którą opisuje się przy użyciu stereodeskryptorów ‘*R*’ i ‘*S*’ (patrz P-93.3.4.1) oraz tetraedryczna konfiguracja, opisana w P-92.1.1.

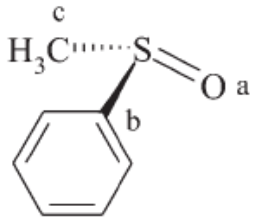
P-93.3.4.1 Symbole chiralności ‘*R*/*S*’

Stereodeskryptorów '*R*' i '*S*' (zdefiniowanych w rozdziale P-92.2) używa się do wskazania konfiguracji absolutnej układu piramidy trygonalnej dyskutowanego w P-93.3.3.2 (patrz reguła IR-9.3.4.3, odn. 12). Atom fantomalny o niskim pierwszeństwie, ale niekoniecznie będący parą elektronów, kreuje tu konfigurację tetraedryczną umożliwiając użycie stereodeskryptorów '*R*/*S*' w sposób opisany dla tetraedrycznych centrów stereogenicznych.

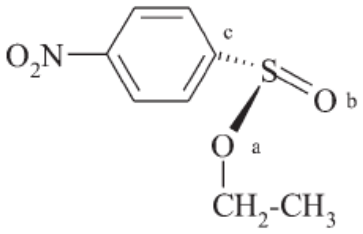
Przykłady:



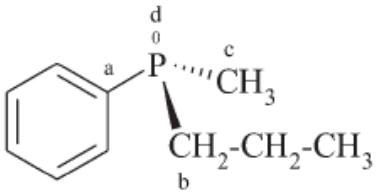
(*S*)-(metanosulfinylo)etan (PIN)



(*S*)-(metanosulfinylo)benzen (PIN)



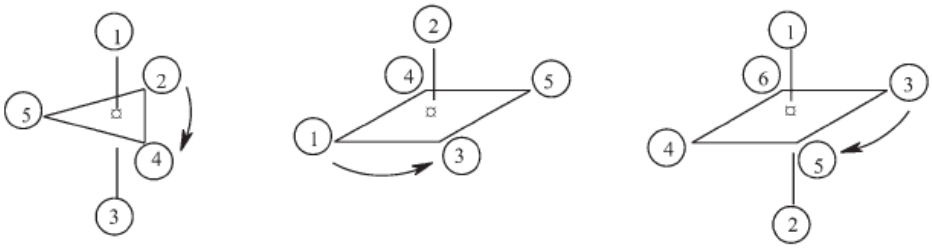
(*R*)-4-nitrobenzeno-1-sulfinian etylu (PIN)



(*R*)-fenylo(metylo)propylofosfan (PIN)
(uwidoczniono związany z atomem fosforu fantomalny atom '0')

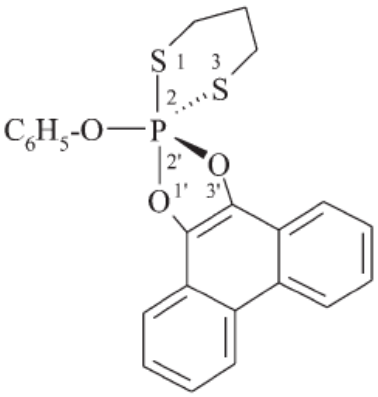
P-93.3.4.2 Symbole chiralności '*A*' i '*C*'

P-93.3.4.2.1 Atomy leżące w płaszczyźnie prostopadłej do osi odniesienia uwidoczniane są od strony zawierającej atomy lub grupy o największym pierwszeństwie (najniższa liczba pierwszeństwa) na osi odniesienia. Jeżeli kierunek ruchu od atomu leżącego w tej płaszczyźnie i mającego największe pierwszeństwo (najniższą liczbę pierwszeństwa) do atomu następnego w kolejności pierwszeństwa jest zgodny z ruchem wskazówek zegara, chiralność określa się jako '*C*', jeżeli zaś przeciwny do ruchu wskazówek zegara – chiralność określa się jako '*A*'. Symbol poliedralny, indeks konfiguracji i symbol chiralności rozdziela się myślnikami, zamyka w nawiasie i umieszcza za początku nazwy (patrz reguła IR-9.3.3.4, odn. 12). Poniżej zilustrowano porządek pierwszeństwa: '1 > 2 > 3 > 4 > 5 > 6', dla konfiguracji bipiramidy trygonalnej, piramidy kwadratowej i oktaedru:



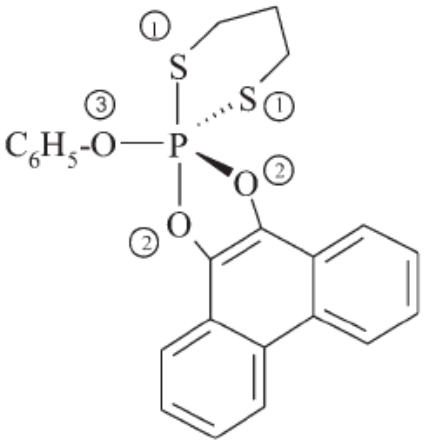
TBPY-5-13-*C* *SPY*-5-25-*A* *OC*-6-24-*C*

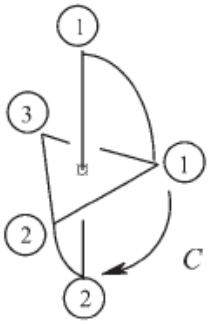
Przykład 1:



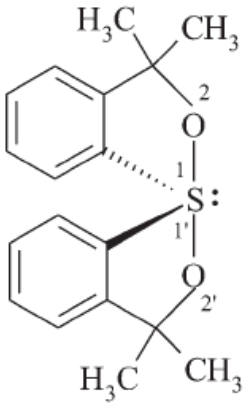
(*TBPY*-5-12-*C*)-2-fenoksy-2*H*-2λ^5-spiro{[1,3,2]-ditiafosfiniano-2,2′-fenantro[9,10-*d*][1,3,2]dioksafosfol} (PIN)

Wyjaśnienie:



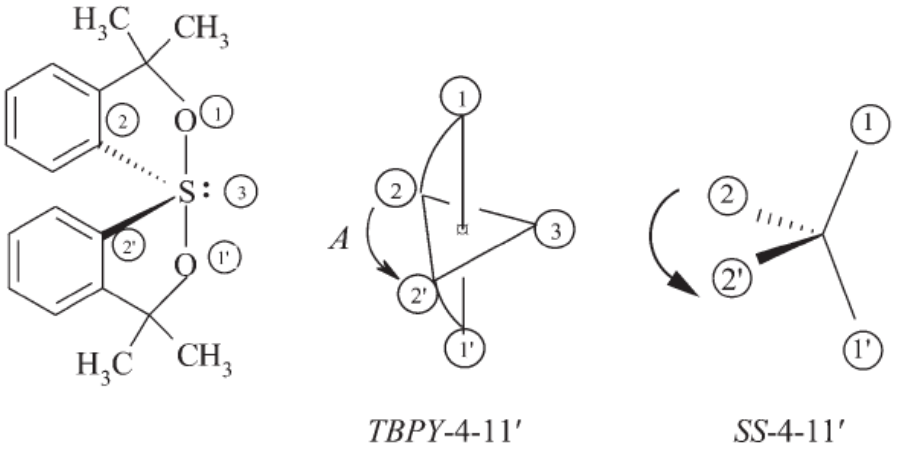


Przykład 2:

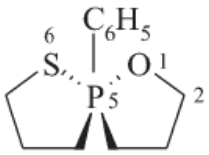


(*SS*-4-11′-*A*)-3,3,3′,3′-tetrametylo-3*H*,3′*H*-1λ^4,1′-spirobi[[2,1]benzoksatiol] (PIN)
{nie (*TBPY*-4-11′-A)-tetrametylo-3*H*,3′*H*-1λ^4,1′-spirobi[[2,1]benzoksatiol]}

Wyjaśnienie:

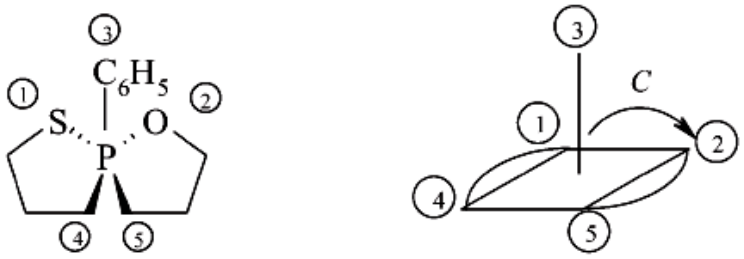


Przykład 3:

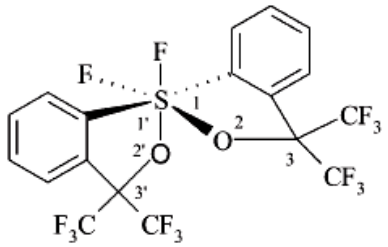


(SPY-5-35-*C*)-5-fenylo-1-oksa-6-tia-5λ^5-fosfaspiro[4.4]nonan (PIN)

Wyjaśnienie:

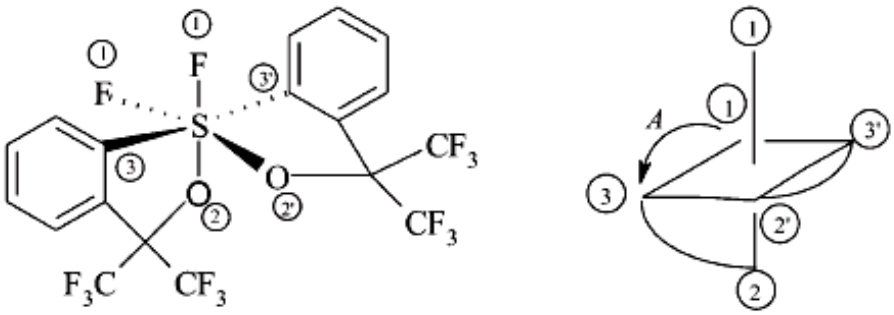


Przykład 4:



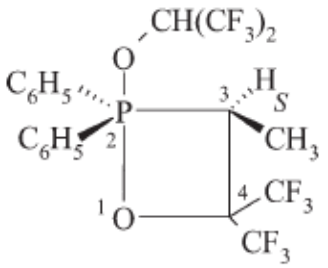
(*OC*-6-22′-*A*)-1,1-difluoro-3,3,3′,3′-tetrakis(trifluorometylo)-1,3′-dihydro-3*H*-1λ^{6},1′-spirobi[[2,1]benzoksatiol] (PIN)

Wyjaśnienie:



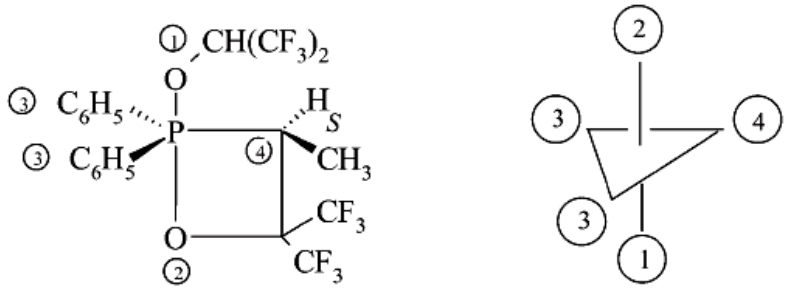
P-93.3.4.2.2 Gdy jest to konieczne, lokant chiralnego centrum umieszcza się przed deskryptorem poliedralnym, zaś inne chiralne centra wymieniane są w porządku wzrastającego lokantu, jak to omówiono w P-91.3; kompletny deskryptor opisujący całkowitą geometrię zamyka się w nawiasie.

Przykład:



[2(TBPY-5-12),3*S*]-2-[(1,1,1,3,3,3-heksafluoropropan-2-ylo)oksy]-3-metylo-2,2-difenylo-4,4-bis(trifluorometylo)-1,2λ^{5}-oksafosfetan (PIN)

Wyjaśnienie:



P-93.4 OKREŚLANIE KONFIGURACJI ACYKLICZNYCH ZWIĄZKÓW ORGANICZNYCH

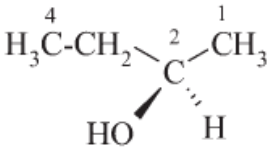
W tym rozdziale przedstawia się system pierwszeństwa CIP jako preferowany sposób określania konfiguracji oraz opisuje się inne sposoby używane w nomenklaturze podstawnikowej. Nazwy preferowane tworzy się w oparciu o zasady, reguły i konwencje opisane w rozdziałach od P-1 do P-8. Numerowania związków dokonuje się przy użyciu reguł opisanych w P-14.4, szczególnie wtedy, gdy ostateczny wybór zależy od obecności stereodeskryptorów. Stereodeskryptory dodawane są do nazw w sposób podany w P-91.3.

P-93.4.1 Określanie centrów stereogenicznych
P-93.4.2 Określanie konfiguracji wiązań podwójnych

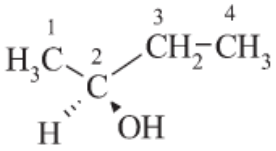
P-93.4.1 Określanie centrów stereogenicznych

P-93.4.1.1 Obecność jednego centrum stereogenicznego wykazuje się stereodeskryptorami '*R*' i '*S*', jak opisano w P-92.2. Jeżeli opis centrum stereogenicznego wymaga użycia lokantu, umieszcza się go przed stereodeskryptorem. W nomenklaturze ogólnej można używać symbolu (±).

Przykłady:



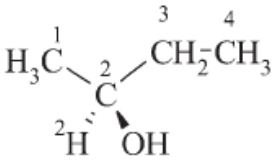
(2*R*)-butan-2-ol (PIN)



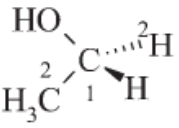
(2*S*)-butan-2-ol (PIN)

Jeżeli jest to niezbędne, przy określaniu konfiguracji związków modyfikowanych izotopowo stosuje się albo tylko regułę 1 albo regułę 1 i regułę 2 łącznie, jak zilustrowano niżej (patrz także P-92.3). Gdy w tym samym miejscu trzeba umieścić stereodeskryptor i deskryptor izotopowy, stereodeskryptor umieszcza się jako pierwszy.

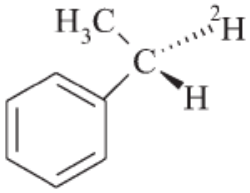
Przykłady:



(2*S*)-(2-^{2}H)butan-2-ol (PIN)



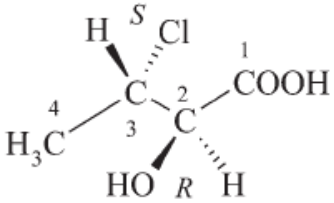
(1*R*)-(1-$^{2}H_{1}$)etan-1-ol (PIN)



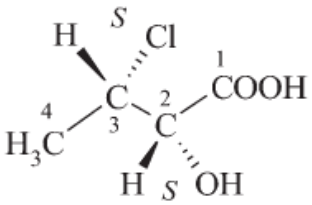
[(1*S*)-(1-$^{2}H_{1}$)etylo]benzene (PIN)

P-93.4.1.2 Gdy przy opisie pojedynczej struktury niezbędne jest użycie dwóch lub większej liczby stereodeskryptorów '*R*' i/lub '*S*', umieszcza się je na początku nazwy, zamyka w nawiasie oddziela od nazwy myślnikiem i wymienia się je w porządku odpowiadających im lokantów, bez względu na rodzaj użytego deskryptora. W rozdziale P-10 opisanych jest wiele przykładów podających konfigurację węglowodanów (patrz P-102.5.2.3), aminokwasów i peptydów (patrz P-103.2.1) oraz lipidów (patrz P-107.4.3). Przykłady podane w tym rozdziale mają na celu ilustrację przypadku użycia stereodeskryptorów dla pseudoasymetrycznych jednostek stereogenicznych oraz sposobu traktowania jednostek niestereogenicznych.

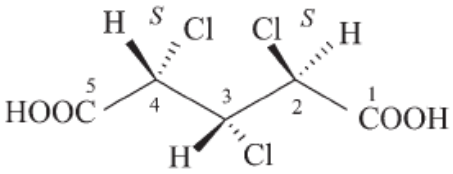
Przykłady:



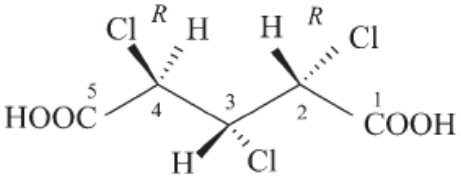
kwas (2*R*,3*S*)-3-chloro-2-hydroksybutanowy (PIN)



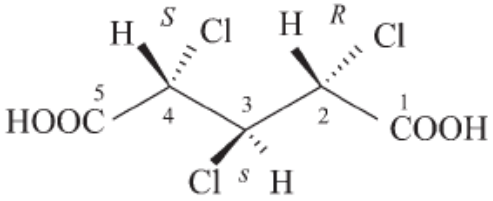
kwas (2*S*,3*S*)-3-chloro-2-hydroksybutanowy (PIN)



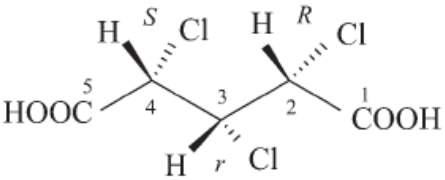
kwas (2*S*,4*S*)-2,3,4-trichloropentanodiowy (PIN)
(niestereogeniczny atom węgla 'C-3' nie jest wskazywany stereodeskryptorem)



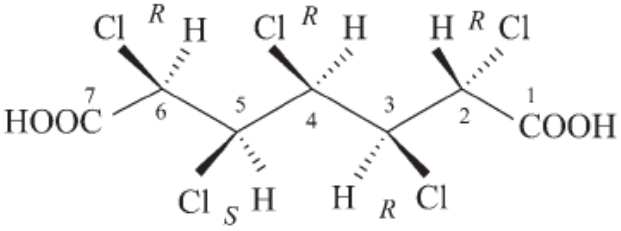
kwas (2*R*,4*R*)-2,3,4-trichloropentanodiowy (PIN)
(niestereogeniczny atom węgla ‘C-3’ nie jest wskazywany stereodeskryptorem)



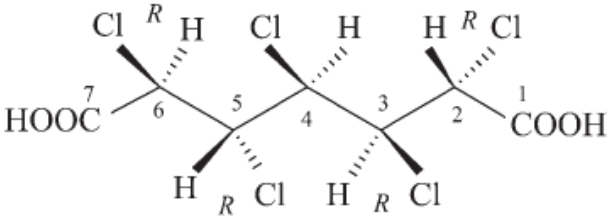
kwas (2*R*,3*s*,4*S*)-2,3,4-trichloropentanodiowy (PIN)
{centrum chiralności ‘*R*’ otrzymuje najniższy lokant [patrz rozdział P-14.4(j)]; zastosowanie reguły sekwencji **5** generuje stereodeskryptor ‘*s*’ na atomie ‘C-3’}



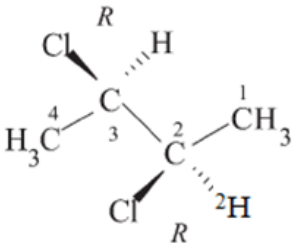
kwas (2*R*,3*r*,4*S*)-2,3,4-trichloropentanodiowy (PIN)
{centrum chiralności ‘*R*’ otrzymuje najniższy lokant [patrz rozdział P-14.4(j)]; zastosowanie reguły sekwencji **5** generuje stereodeskryptor **‘***r*’ na atomie ‘C-3’}



kwas (2*R*,3*R*,4*R*,5*S*,6*R*)-2,3,4,5,6-pentachloroheptanodiowy (PIN)
[zastosowanie reguły sekwencji **4** (RR > SR**)** generuje stereodeskryptor ‘*R*’ na atomie ‘C-4’]



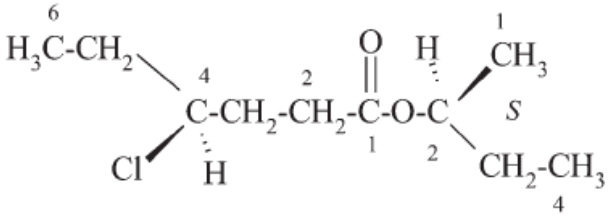
kwas (2*R*,3*R*,5*R*,6*R*)-2,3,4,5,6-pentachloroheptanodiowy (PIN)
(atom węgla ‘C-4’ jest jednostką niestereogeniczną)



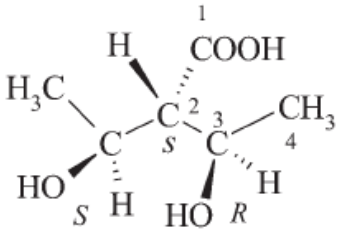
(2*R*,3*R*)-2,3-dichloro-(2-$^{2}H_{1}$)butan (PIN)

P-93.4.1.3 Jeżeli stereodeskryptor oznacza konfigurację składnika, wskazywanego w nazwie przedrostkiem, bądź występującego w nazwie klasowo-funkcyjnej, wówczas umieszcza się go bezpośrednio przed nazwą składnika, którego ten stereodeskryptor dotyczy.

Przykłady:



(4*S*)-4-chloroheksanian (2*S*)-butan-2-ylu (PIN)



kwas (2*s*,3*R*)-3-hydroksy-2-[(1*S*)-1-hydroksyetylo]butanowy (PIN)

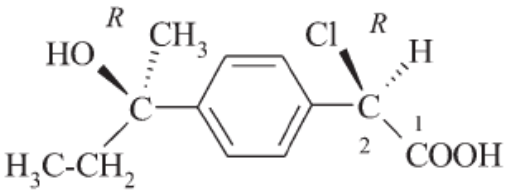
Wyjaśnienie: W procesie tworzenia pełnej nazwy wyróżnia się cztery etapy:

Etap 1: centrom stereogenicznym zawierającym grupę hydroksylową przyporządkowuje się konfiguracje '*R*' i '*S*';

Etap 2: centrum pseudoasymetrycznemu przyporządkowuje się konfigurację '*s*';

Etap 3: wybiera się łańcuch główny zawierający maksymalną licz-bę centrów stereogenicznych o konfiguracji '*R*' (patrz P-45.6.4);

Etap 4: nazwę tworzy się umieszczając stereodeskryptory przed łańcuchem głównym i przed podstawnikiem.



kwas (2*R*)-2-chloro-2-{4-[(2*R*)-2-hydroksybutan-2-ylo]fenylo}octowy (PIN)

P-93.4.2 Określanie konfiguracji wiązań podwójnych

P-93.4.2.1 Określanie konfiguracji podwójnych wiązań
P-93.4.2.2 Alleny i kumuleny o parzystej liczbie podwójnych wiązań
P-93.4.2.3 Kumuleny o nieparzystej liczbie podwójnych wiązań
P-93.4.2.4 Określanie konfiguracji związków nienasyconych zawierających kilka jednostek stereogenicznych

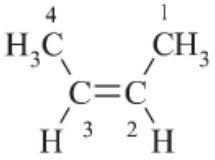
P-93.4.2,1 Określanie konfiguracji podwójnych wiązań

P-93.4.2.1.1 Stereodeskryptory '*Z*' i '*E*' oraz '*cis*' i '*trans*'

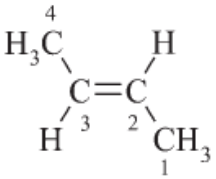
Stereodeskryptory '*Z*' i '*E*' zdefiniowano w P-92.4; są one zalecanymi stereodeskryptorami opisującymi konfigurację podwójnych wiązań w preferowanych nazwach IUPAC. Niniejszy rozdział opisuje sposób ich stosowania w nomenklaturze. Zastępują one stereodeskryptory '*cis*' i '*trans*', które w dalszym ciągu są zalecane w nomenklaturze ogólnej oraz w nomenklaturze karotenoidów.

Stereodeskryptorów '*cis*' i '*trans*' używa się w nomenklaturze ogólnej tylko do opisu podwójnych wiązań zawierających dwa atomy wodoru – po jednym na każdym z atomów węgla. Odpowiadające im lokanty, niezbędne do opisu podwójnego wiązania używane są jedynie ze stereodeskryptorami '*Z*' i '*E*', nie stosuje się ich natomiast z deskryptorami '*cis*' i '*trans*'. Lokanty umieszcza się przed stereodeskryptorami i zamyka w nawiasie, po którym umieszcza się myślnik.

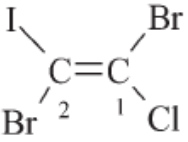
Przykłady:



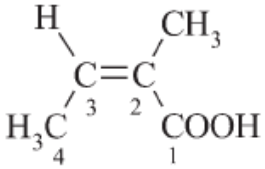
(2*Z*)-but-2-en (PIN)
cis-but-2-en



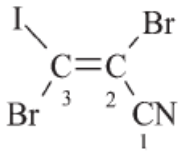
(2*E*)-but-2-en (PIN)
trans-but-2-en



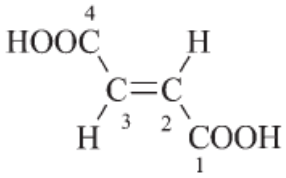
(1*Z*)-1,2-dibromo-1-chloro-2-jodoetan (PIN)



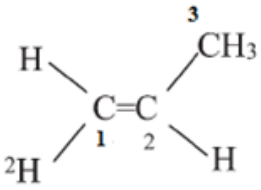
kwas (2*Z*)-2-metylobut-2-enowy (PIN)



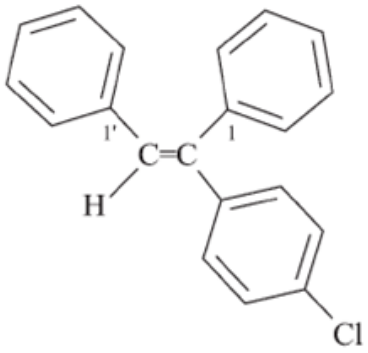
(2*Z*)-2,3-dibromo-3-jodoprop-2-enonitryl (PIN)
(2*Z*)-2,3-dibromo-3-jodoakrylonitryl



kwas (2*E*)-but-2-enowy (PIN)
kwas fumarowy (konfiguracja wskazana jest w nazwie zwyczajowej)



(1*E*)-(1-$^{2}H_{1}$)prop-1-en (PIN)
trans-(1-$^{2}H_{1}$)prop-1-en



1,1′-[(1*E*)-1-(4-chlorofenylo)eteno-1,2-diylo]dibenzen (PIN, patrz P-93.6)
4-chloro-1,1′-[(1*E*)-1-fenyloeteno-1,2-diylo]dibenzen

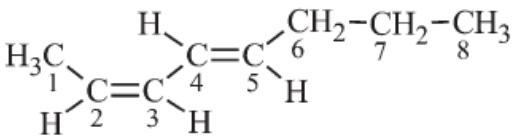
P-93.4.2.1.2 Związki zawierające więcej niż jedno podwójne wiązanie

Gdy w związku występuje więcej niż jedno podwójne wiązanie, używa się stereodeskryptorów ‘*E*’ i ‘*Z*’ poprzedzonych odpowiednimi lokantami i umieszczonych przed całkowitą nazwą związku. Lokantów łańcucha używa się w sytuacji, gdy wiązania podwójne mają ułożenie ‘egzo’ w stosunku do łańcucha (patrz podany niżej przykład 4). Gdy w nazwie występuje więcej niż jeden stereodeskryptor, deskryptory wymieniane są w rosnącym porządku odpowiadających im lokantów.

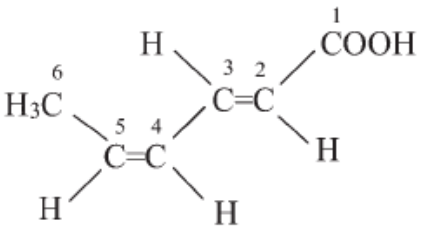
Gdy możliwa jest alternatywna numeracja łańcucha, pierścienia lub zespołu pierścieni, wybiera się taki sposób numerowania, dla którego w pierwszym miejscu wystąpienia różnicy (w stosunku do nazwy dla alternatywnego sposobu numeracji) występuje ułożenie ‘*cis*’. Należy pamiętać, że ułożenie ‘*cis*’ określane jest za pomocą stereodeskryptora ‘*Z*’.

Stereodeskryptorów ‘*cis*’ i ‘*trans*’ używa się do opisu podwójnych wiązań zawierających dwa atomy wodoru – po jednym na każdym z atomów węgla, jednak przy tworzeniu preferowanych nazw IUPAC używa się stereodeskryptorów ‘*E*’ i ‘*Z*’. Stereodeskryptory ‘*cis*’ i ‘*trans*’ zamyka się w nawiasie, poprzedza odpowiednim lokantem po którym umieszcza się myślnik i umieszcza się na początku nazwy.

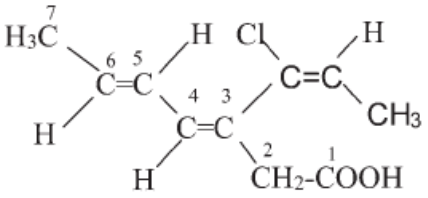
Przykłady:



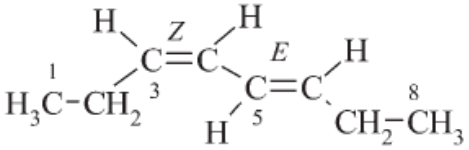
(2*Z*,4*E*)-okta-2,4-dien (PIN)
(2-*cis*,4-*trans*)-okta-2,4-dien



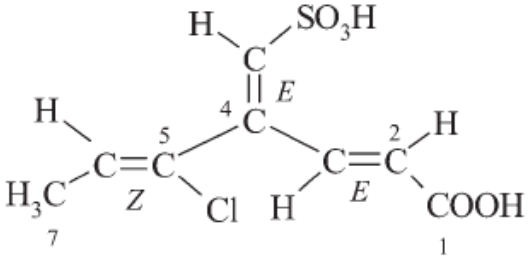
kwas (2*E*,4*Z*)-heksa-2,4-dienowy (PIN)
kwas (2-*trans*,4-*cis*)-heksa-2,4-dienowy



kwas (3Z,5E)-3-[(1E)-1-chloroprop-1-en-1-ylo]hepta-3,5-dienowy (PIN)



(3*Z*,5*E*)-okta-3,5-dien (PIN)
(3-*cis*,5-*trans*)-okta-3,5-dien
{wiązanie podwójne o konfiguracji *cis* powinno mieć niższy lokant [patrz P- 14.4(j)]

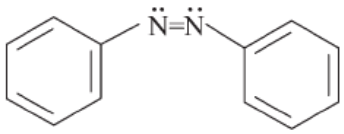


kwas (2E,4E,5Z)-5-chloro-4-(sulfometylideno)hepta-2,5-dienowy (PIN)

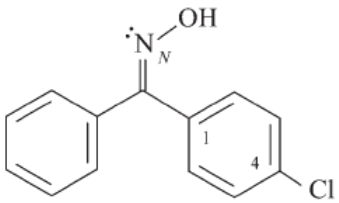
P-93.4.2.1.3 Deskryptory ‘*E*’ i ‘*Z*’ w opisie podwójnych wiązań zawierających heteroatomy

Stereodeskryptorów ‘*E*’ i ‘*Z*’ używa się także przy określaniu konfiguracji podwójnych wiązań tworzonych przez atomy inne niż węgiel. Gdy obecna jest wolna para elektronów, przyporządkowuje się jej liczbę atomową ‘0’ (zero). Deskryptory ‘*syn*’ i ‘*anti*’ oraz ‘*cis*’ i ‘*trans*’ nie są już obecnie zalecane. Przed stereodeskryptorem nie umieszcza się lokantu, gdy lokant nie występuje w nazwie, zaś nazwę umieszcza się w nawiasie, jak to omówiono w rozdziale P-93.2.1.

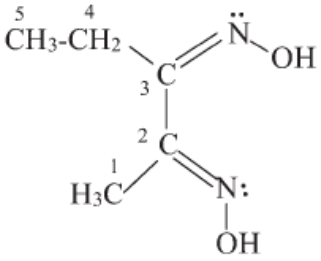
Przykłady:



(*Z*)-difenylodiazen (PIN)
(nie *cis*-difenylodiazen)



(*Z*)-{N-[(4-chlorofenylo)(fenylo)metylideno]hydroksyloamina} (PIN)
(*Z*)-[oksym (4-chlorofenylo)fenylometanonu]

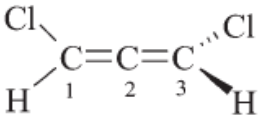


(2*E*,3*Z*)-pentan-2,3-diylidenobis(hydroksyloamina) (PIN)
dioksym (2*E*,3*Z*)-pentano-2,3-dionu

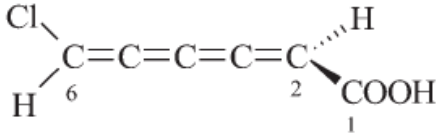
P-93.4.2.2 Alleny i kumuleny o parzystej liczbie podwójnych wiązań

Odpowiednio podstawione alleny mogą być związkami chiralnymi mającymi oś chiralności. W tym wypadku chiralność opisywana jest przy pomocy stereodeskryptorów 'R_a' i 'S_a' lub '*M*' i '*P*', jak opisano, odpowiednio, w P.92.1.2.1.2 i P-92.1.2.2.1. Stereodeskryptory '*M*' i '*P*' są preferowane w stosunku do 'R_a' i 'S_a' w preferowanych nazwach IUPAC. Stereodeskryptor '*M*' lub '*P*' opisujący układ kumulenu poprzedza się lokantem wskazującym początek skumulowanego układu podwójnych wiązań, mającego kolejne rosnące lokanty różniące się o jeden. Złożone lokanty używa się jedynie wtedy, gdy lokanty wiązań podwójnych nie są kolejnymi liczbami jak pokazano w P-93.5.2.3.

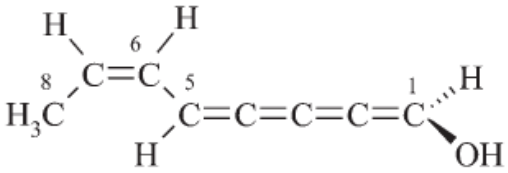
Przykłady:



(1*M*)-1,3-dichloropropa-1,2-dien (PIN)
(1R_a)-1,3-dichloropropa-1,2-dien



kwas (2*P*)-6-chloroheksa-2,3,4,5-tetraenowy (PIN)
kwas (2S_a)-6-chloroheksa-2,3,4,5-tetraenowy



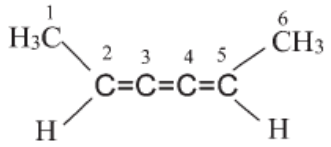
(1*P*,6*Z*)-okta-1,2,3,4,6-pentaen-1-ol (PIN)
(1S_a,6*Z*)-okta-1,2,3,4,6-pentaen-1-ol

P-93.4.2.3 Kumuleny o nieparzystej liczbie podwójnych wiązań

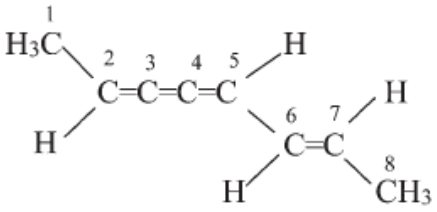
Kumuleny zawierające nieparzystą liczbę podwójnych wiązań są cząsteczkami planarnymi – tak, jak podwójne wiązania. Preferowanymi stereodeskryptorami są '*E*' i '*Z*'. W nomenklaturze ogólnej można stosować stereodeskryptory '*cis*' i '*trans*'.

Stereodeskryptor '*E*' i '*Z*' opisujący układ kumulenu poprzedza się lokantem wskazującym początek skumulowanego układu podwójnych wiązań mającego kolejne rosnące lokanty różniące się o jeden. Złożone lokanty używa się jedynie wtedy, gdy lokanty wiązań podwójnych nie są kolejnymi liczbami jak o pokazano w P-93.5.2.3.

Przykłady:



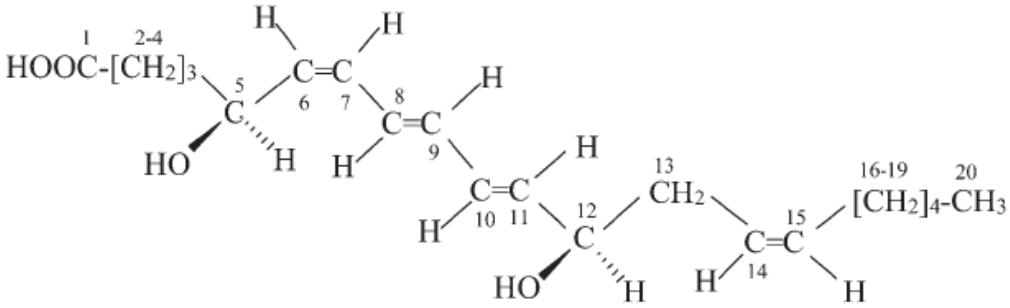
(2*Z*)-heksa-2,3,4-trien (PIN)
cis-heksa-2,3,4-trien



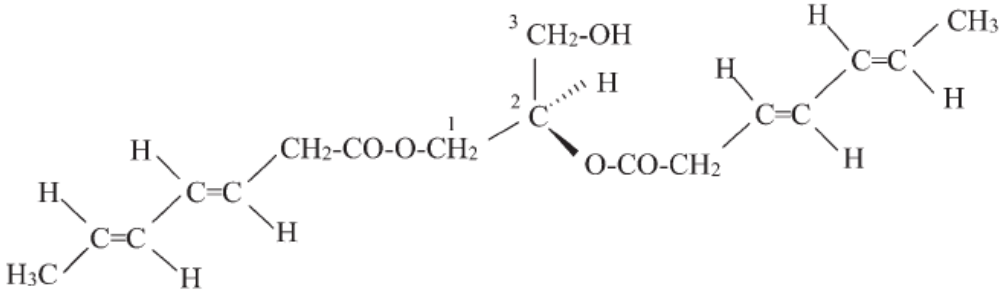
(2*E*,6*E*)-okta-2,3,4,6-tetraen (PIN)
(2-*trans*,6-*trans*)-okta-2,3,4,6-tetraen

P-93.4.2.4 Określanie konfiguracji w związkach z wieloma jednostkami stereogenicznymi

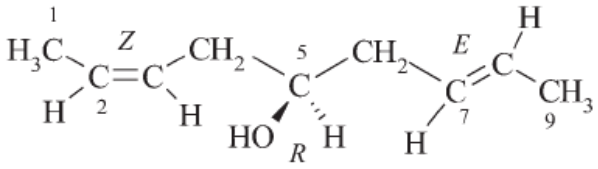
Gdy związki chiralne zawierają wiele wiązań podwójnych, >C=C<, używa się stereodeskryptory w sposób opisany wyżej. Stereodeskryptor umieszcza się na początku nazwy albo przed podstawnikiem lub odpowiednim fragmentem nazwy w rosnącym porządku lokantów. Aby zapoznać się z nomenklaturą takich związków nienasyconych patrz P-92.4.2.



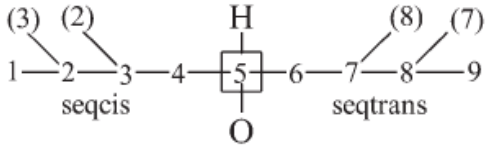
kwas (5*S*,6*Z*,8*E*,10*E*,12*R*,14*Z*)-5,12-dihydroksyejkoza-6,8,10,14-tetraenowy (PIN)
kwas (5*S*,6-*cis*,8-*trans*,10-*trans*,12*R*,14-*cis*)-5,12-dihydroksyejkoza-6,8,10,14-tetraenowy



di[(3*E*,5*E*)-hepta-3,5-dienian] (2*R*)-3-hydroksypropan-1,2-diylu (PIN)
di[(3-*trans*,5-*trans*)-hepta-3,5-dienian] (2*R*)-3-hydroksypropan-1,2-diylu



(2*Z*,5*R*,7*E*)-nona-2,7-dien-5-ol (PIN)



uproszczony digraf

P-93.5 OKREŚLANIE KONFIGURACJI CYKLICZNYCH ZWIĄZKÓW ORGANICZNYCH

P-93.5.0 Wprowadzenie
P-93.5.1 Związki monocykliczne
P-93.5.2 Związki von Baeyera
P-93.5.3 Spirozwiązki
P-93.5.4 Związki skondensowane i mostkowe skondensowane
P-93.5.5 Cyklofany
P-93.5.6 Fullereny
P-93.5.7 Zespoły pierścieni

P-93.5.0 Wprowadzenie

W rozdziale tym omawiane jest zastosowanie stereodeskryptorów CIP do związków monocyklicznych. Stereodeskryptory używane wcześniej, przed wprowadzeniem systemu CIP są w dalszym ciągu zalecane w przypadku ogólnej nomenklatury i są obligatoryjne w dziedzinie związków naturalnych, co omawiane jest w rozdziale P-10.

W ogólnej nomenklaturze podstawnikowej IUPAC używa się następujących stereodeskryptorów nie będących stereodeskryptorami CIP: '*cis*', '*trans*' (patrz P-93.5.1.2); '*r*', '*c*', '*t*' (patrz P-93.5.1.3); '*endo*', '*egzo*', '*syn*', '*anti*' (patrz P-93.5.2.2.1).

P-93.5.1 Związki monocykliczne

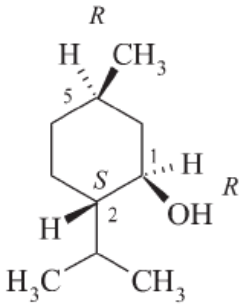
P-93.5.1.1 Określanie stereogenicznych centrów: stereode-skryptory '*R*', '*S*', '*r*' i '*s*'
P-93.5.1.2 Konfiguracja względna: stereodeskryptory '*cis*' i '*trans*'
P-93.5.1.3 Konfiguracja względna: stereodeskryptory '*r*', '*c*' i '*t*'
P-93.5.1.4 Nienasycone związki alicykliczne

P-93.5.1.1 Określanie stereogenicznych centrów: stereodeskryptory '*R*', '*S*', '*r*' i '*s*'

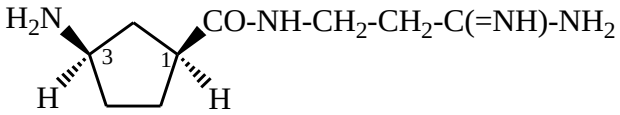
P-93.5.1.1.1 Konfiguracja absolutna

W podstawionych związkach monocyklicznych konfigurację w preferowanych nazwach IUPAC określa się przy użyciu stereodeskryptorów: '*R*', '*S*', '*r*' i '*s*'.

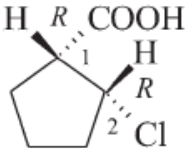
Przykłady:



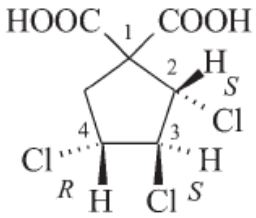
(1*R*,2*S*,5*R*)-5-metylo-2-(propan-2-ylo)cykloheksan-1-ol (PIN)



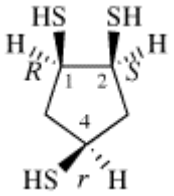
(1*S*,3*R*)-3-amino-*N*-(3-amino-3-iminopropylo)cyklopentano-1-karboksyamid (PIN)
amidynomycyna



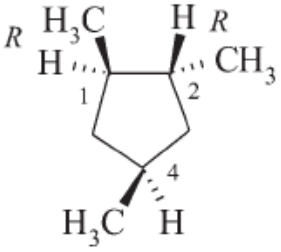
kwas (1*R*,2*R*)-2-chlorocyklopentano-1-karboksylowy (PIN)



kwas (2*S*,3*S*,4*R*)-2,3,4-trichlorocyklopentano-1,1-dikarboksylowy (PIN)



(1*R*,2*S*,4*r*)-cyklopentano-1,2,4-tritiol (PIN)



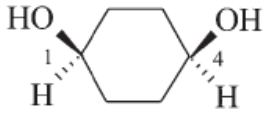
(1*R*,2*R*)-1,2,4-trimetylocyklopentan (PIN)
(centrum ‘C-4’ nie przyporządkowuje się stereodeskryptora; jest to centrum niestareogeniczne)

P-93.5.1.1.2 Achiralne związki cykliczne

W preferowanych nazwach IUPAC achiralnych cyklicznych cząsteczek konfigurację określa się także przy użyciu stereodeskryptorów CIP.

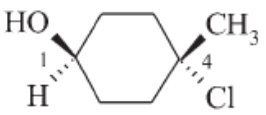
(a) Konfiguracja centrów pseudoasymetrycznych, na przykład na ‘C-1’ i ‘C-4’ 1,4-dwupodstawionych pochodnych cykloheksanu określana jest w oparciu o metodologię omówioną w przykładzie 2 w P-92.6.

Przykłady:

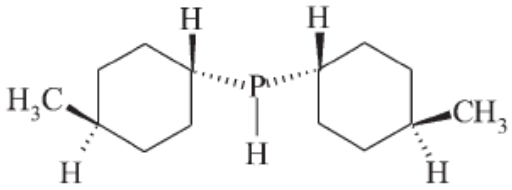


(1*s*,4*s*)-cykloheksano-1,4-diol (PIN)
cis-cykloheksano-1,4-diol

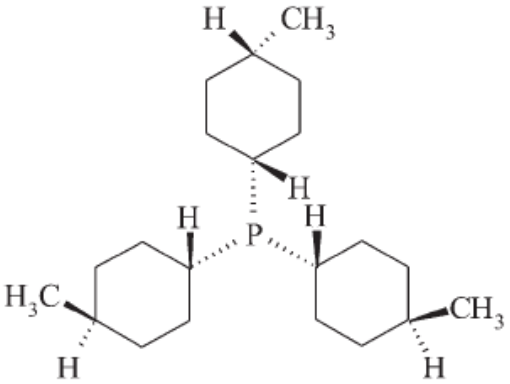
(1*r*,4*r*)-cykloheksano-1,4-diol (PIN)
trans-cykloheksano-1,4-diol



(1*r*,4*r*)-4-chloro-4-metylocykloheksan-1-ol (PIN)
trans-4-chloro-4-metylocykloheksan-1-ol

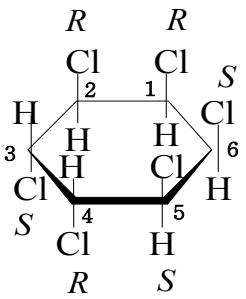


bis[(1*r*,4*r*)-4-metylocykloheksylo]fosfan (PIN)
bis(*trans*-4-metylocykloheksylo)fosfan

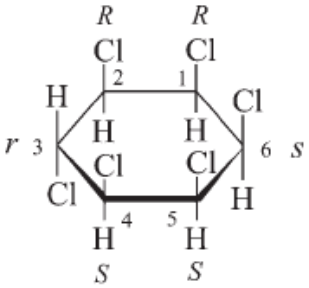


bis[(1*r*,4*r*)-4-metlocykloheksylo](1*s*,4*s*)-4-metylocykloheksylofosfan (PIN)
bis(*trans*-4-metylocykloheksylo)-*cis*-4-metylocykloheksylofosfan

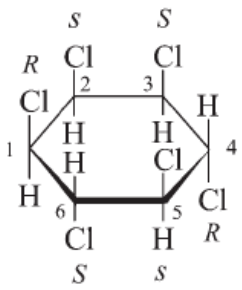
(b) Poniżej opisano chiralne izomery 1,2,3,4,5,6-sześciopodstawionego identycznymi podstawnikami cykloheksanu. Metodą opisaną w rozdziale P-92.5, dla chiralnego izomeru, wyczerpująco stosuje się regułę sekwencji **4**, a następnie regułę **5** (patrz P-92.6) w celu nazwania pseudoasymetrycznych centrów stereogenicznych. Każdemu stereoizomerowi o numerach od **1** do **7** przyporządkowuje się zbiór stereodeskryptorów CIP; umieszcza się go z przodu nazwy podstawnikowej, jak to pokazano dla pierwszego enancjomeru z serii prezentowanej niżej: (1*R*,2*R*,3*S*,4*R*,5*S*,6*S*)-1,2,3,4,5,6-heksachlorocykloheksan (patrz rozdział P-93.5.1.3.2 dla preferowanej nazwy IUPAC, 1,2,3,4,5,6-heksachlorocykloheksan).



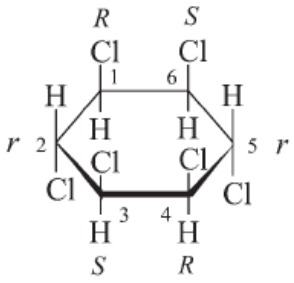
1 (1*R*,2*R*,3*S*,4*R*,5*S*,6*S*)



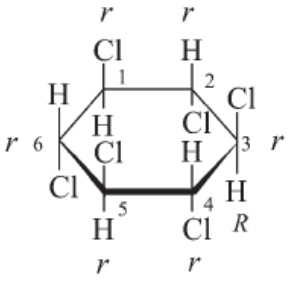
2 (1*R*,2*R*,3*r*,4*S*,5*S*,6*r*)



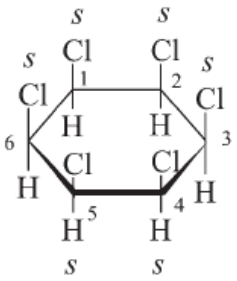
3 (1*R*,2*s*,3*S*,4*R*,5*s*,6*S*)



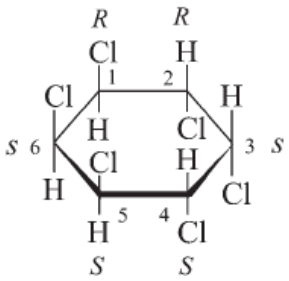
4 (1*R*,2*r*,3*S*,4*R*,5*r*,6*S*)



5 (1*r*,2*r*,3*r*,4*r*,5*r*,6*r*)



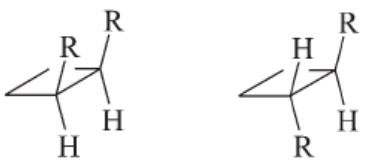
6 (1*s*,2s,3*s*,4*s*,5*s*,6*s*)



7 (1*R*,2*R*,3*s*,4*S*,5*S*,6*s*)

P-93.5.1.2 Konfiguracja względna: stereodeskryptory ‘*cis*’ i ‘*trans*’

Stereodeskryptory ‘*cis*’ i ‘*trans*’ używa się do opisu relacji między dwoma ligandami (atomami lub grupami) połączonymi z oddzielnymi atomami pierścienia lub układu pierścieni. Mówi się, że te dwa ligandy usytuowane są w stosunku do siebie w pozycji ‘*cis*’, jeżeli leżą po tej samej stronie płaszczyzny. Jeżeli znajdują się one po przeciwnych stronach, ich wzajemne ułożenie określa się jako ‘*trans*’. Odpowiednia płaszczyzna odniesienia pierścienia lub układu pierścieni (pierścień może mieć konformację rzeczywistą lub umownie założoną, bez kątów wklęsłych w dwóch miejscach podstawienia) jest średnią płaszczyzną pierścienia. Stereodeskryptory te określają konfigurację względną; konfiguracja absolutna musi być opisywana przy pomocy stereodeskryptorów CIP – takich jak ‘*R*’ i ‘*S*’.

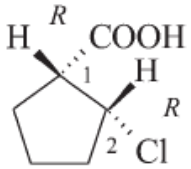


cis *trans*

Poniższe struktury wyglądają na izomery *cis*-*trans*, jednak w rzeczywistości są to dwie różne konformacje tego samego stereoizomeru '*cis*'. W konformacji widocznej po lewej stronie na stereogenicznym centrum 'C-1' występuje kąt wklęsły.

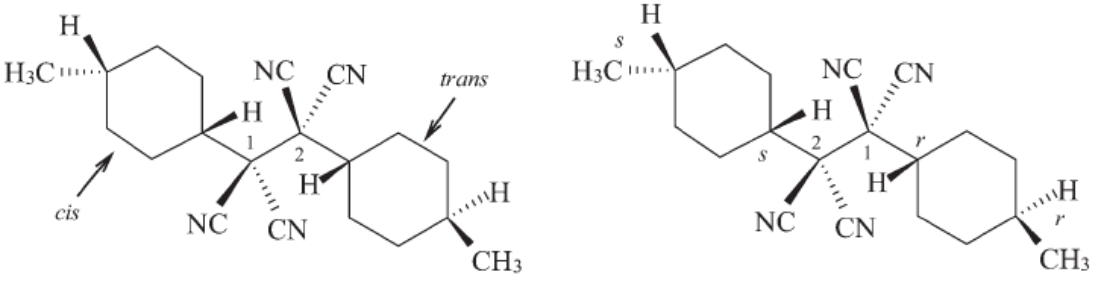
Gdy do każdej z dwu pozycji pierścienia przyłączony jest jeden ligand i jeden atom wodoru, relację steryczną (konfigurację względną) tych dwóch ligandów wyraża się jako '*cis*' lub '*trans*' z następującym po tych stereodeskryptorach myślnikiem i umieszcza przed nazwą związku. Nie ma potrzeby użycia lokantów przed stereodeskryptorami. Gdy przy tworzeniu nazwy istnieje możliwość wyboru kolejności, ułożenie '*cis*' wymieniane jest w nazwie przed ułożeniem '*trans*'. Przy opisie konfiguracji względnej stereodeskryptory '*R*' i '*S*' poprzedzone członem '*rel*' są preferowane przed '*R**' i '*S**' a także przed '*cis*' i '*trans*'. (patrz rozdział P-93.1.2).

Przykłady:



lub enancjomer

kwas *cis*-2-chlorocyklopentano-1-karboksylowy
kwas *rel*-(1*R*,2*R*)-2-chlorocyklopentano-1-karboksylowy (PIN)
kwas (1*R**,2*R**)-2-chlorocyklopentano-1-karboksylowy
[nie kwas *rel*-(1*S*,2*S*)-2-chlorocyklopentano-1-karboksylowy]
[nie kwas (1*S**,2*S**)-2-chlorocyklopentano-1-karboksylowy]



I **II**

(I) 1-(cis-4-metylocykloheksylo)-2-(*trans*-4-metylocykloheksylo)etano-1,1,2,2-tetrakarbonitryl

(II) 1-[(1*r*,4*r*)-4-metylocykloheksylo]-2-[(1*s*,4*s*)-4-metylocykloheksylo]etano-1,1,2,2-tetrakarbonitryl (PIN; użycie stereodeskryptorów CIP generuje preferowaną nazwę IUPAC}

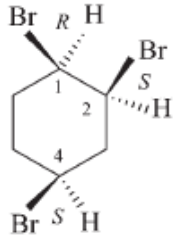
Wyjaśnienie: W strukturze **I** lokant ‘1’ przyporządkowany jest stereodeskryptorowi ‘*cis*’ nie będącemu stereodeskryptorem CIP, a w strukturze **II** – CIP-stereodeskryptorowi ‘*r*’. W nazwie stereodeskryptor ‘*cis*’ wymienia się przed ‘*trans*’ a ‘*r*’ przed ‘*s*’.

P-93.5.1.3 Konfiguracja względna: stereodeskryptory ‘*r*’, ‘*c*’ i ‘*t*’

P-93.5.1.3.1 Gdy w więcej niż dwu pozycjach pierścienia występuje po jednym ligandzie i po jednym atomie wodoru, relację steryczną tych dwóch ligandów wyraża się dodając symbol ‘*r*’ (ligand odniesienia) z następującym po nim myślnikiem i lokantem, który jest najniższym spośród lokantów ligandów oraz symbole ‘*c*’ dla ‘*cis*’ i ‘*t*’ dla ‘*trans*’ (o ile jest to potrzebne) z następującymi po nich myślnikami i lokantami pozostałych ligandów, które wyrażają relacje względem ligandu odniesienia. Konfigurację względną wyraża się poprzez stereodeskryptory. Metodę tę można ponadto stosować do opisu racematów. Przy tworzeniu preferowanych nazw IUPAC preferowanymi stereodeskryptorami są opisane w systemie CIP omówionym w P-91 i P-92 wraz ze stereodeskryptorami takimi, jak ‘*R*’ i ‘*S*’ (opisującymi konfigurację absolutną), przedrostkiem ‘*rel*’ wyrażającym konfigurację względną i ‘*rac*’ dla racematów, jak opisano w P-93.1.3

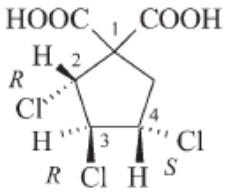
Notacja polegająca na dodaniu deskryptora ‘*r*’ (dla ligandu odniesienia) z następującym po nim myślnikiem i lokantem, który jest najniższym spośród lokantów podstawników oraz symbole ‘*c*’ (dla ‘*cis*’) i odpowiednio ‘*t*’ (dla ‘*trans*’) z następującymi po nich myślnikami oraz lokantami innych podstawników [używana w przewodniku IUPAC ‘Nomenklatura Związków Organicznych’, poz. (2) z 1993 r] nie jest już obecnie zalecana.

Przykład 1:



1-*r*,2-*c*,4-*c*-tribromocykloheksan
rel-(1*R*,2S,4S)-1,2,4-tribromocykloheksan (PIN)

Przykład 2:



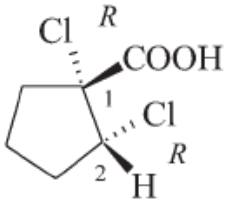
lub enancjomer

kwas 2-*r*,3-*t*,4-*c*-trichlorocyklopentano-1,2-dikarboksylowy
kwas *rel*-(2*R*,3*R*,4*S*)-2,3,4- trichlorocyklopentano-1,2-dikarboksylowy (PIN)
kwas (2*R**,3*R**,4*S**)-2,3,4- trichlorocyklopentano-1,2-dikarboksylowy
[nie kwas *rel*-(2*S*,3*S*,4*R*)-2,3,4- trichlorocyklopentano-1,2-dikarboksylowy; najmniejszy lokant musi być związany ze stereodeskryptorem ‘*R*’]
[nie kwas (2*S**,3*S**,4*R**)-2,3,4- trichlorocyklopentano-1,2-dikarboksylowy; najmniejszy lokant musi być związany ze stereodeskryptorem ‘*R**’]

P-93.5.1.3.2 Gdy dwa różne ligandy przyłączone są do pierścienia w tej samej pozycji, wówczas ligand o najmniejszym lokancie, wymieniany w nazwie w postaci przyrostka wybiera się jako ligand

odniesienia. Jeżeli żaden ligand nie jest wymieniany w nazwie jako przyrostek, wówczas jako ligand odniesienia z pary ligandów wybiera się ligand o mniejszym lokancie, który ma większe pierwszeństwo zgodnie z regułami sekwencji. W geminalnie podstawionych pozycjach relację grupy o większym pierwszeństwie w stosunku do grupy odniesienia zaznacza się za pomocą symbolu '*c*' lub '*t*'.

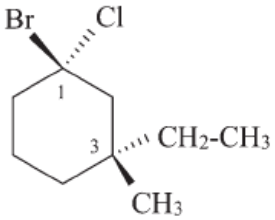
Przykład 1:



lub enancjomer

kwas 1,2-*t*-dichlorocyklopentano-1-karboksylowy
kwas *rel*-(1*R*,2*R*)-1,2-dichlorocyklopentano-1-karboksylowy (PIN)

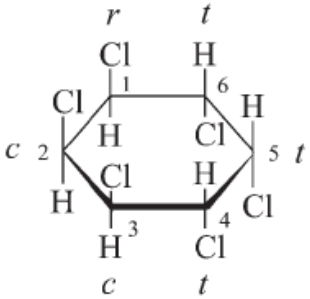
Przykład 2:



lub enancjomer

1-*r*-bromo-1-chloro-3-t-etylo-3-metylocykloheksan
rel-(1*R*,3*R*)-1-bromo-1-chloro-3-etylo-3-metylocykloheksan (PIN)
(1*R**,3*R**)-1-bromo-1-chloro-3-etylo-3-metylocykloheksan

Przykład 3:



(1*R*,2*R*,3*s*,4*S*,5*S*,6*s*)-1,2,3,4,5,6-heksachlorocykloheksan (PIN)
1-*r*,2-*c*,3-*c*,4-*t*,5-*t*,6-*t*-heksachlorocykloheksan

Wyjaśnienie: W tym związku konieczne są różne numeracje w celu uwzględnienia pierwszeństwa ligandu o konfiguracji '*R*' oraz konieczności przyporządkowania najniższych lokantów grupom będącym w ułożeniu '*cis*'. [powyższy związek stanowi przykład 7 omawiany w P-93.5.1.1.2(b); inne izomery omówione są w P-92.5.2.1 i P-93.5.1.1.2(b)].

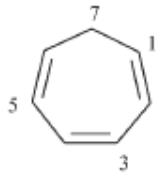
P-93.5.1.4 Nienasycone związki alicykliczne

P-93.5.4.1 Określanie cyklicznych wiązań podwójnych
P-93.5.4.2 Określanie *egzo*-cyklicznych wiązań podwójnych

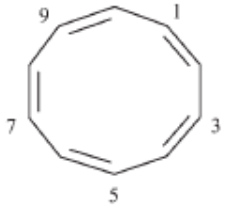
P-93.5.1.4.1 Określanie cyklicznych wiązań podwójnych

W pierścieniach od trój- do siedmioczłonowego cykliczne podwójne wiązanie ma konfigurację '*cis*'; deskryptory 'Z' i 'cis', jako opisujące cykliczne podwójne wiązania (wiązania zawarte w pierścieniu) są zawsze w takim wypadku pomijane. Poczynając od pierścienia ośmioczłonowego, cykliczne podwójne wiązanie może przyjmować konfigurację '*cis*' lub '*trans*'; w preferowanych nazwach IUPAC w celu opisu tych ułożeń należy używać stereodeskryptorów '*Z*' i '*E*' zaś stereodeskryptory '*cis*' i '*trans*' stosuje się w nomenklaturze ogólnej.

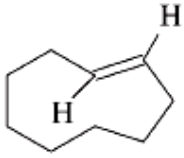
Przykłady:



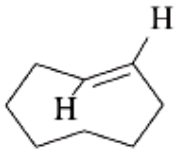
cyklohepta-1,3,5-trien (PIN)



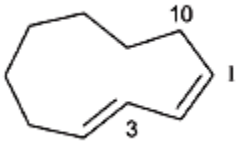
(1*Z*,3*Z*,5*Z*,7*Z*,9*Z*)-cyklodeka-1,3,5,7,9-pentaen (PIN)



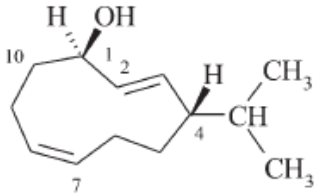
(*E*)-cyklononen (PIN)



(*E*)-cyklookten (PIN)



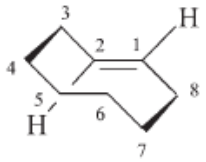
(1*Z*,3*E*)-cyklodeka-1,3-dien (PIN)
1-cis,3-trans-cyklodeka-1,3-dien
[najmniejszy lokant przypisuje się podwójnemu wiązaniu o konfiguracji 'Z'; patrz P-14(j)]

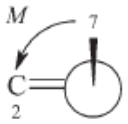


(1*R*,2*E*.4*S*,7*Z*)-4-(propan-2-ylo)cyklodeka-2,7-dien-1-ol (PIN)
2-*trans*,7-*cis*-(1*R*,4*S*)-4-(propan-2-ylo)cyklodeka-2,7-dien-1-ol

Do opisu konfiguracji chiralnych '*E*'-izomerów cykloalkenów używa się stereodeskryptory '*M*', '*P*', 'R_a' lub 'S_a'. Stereodeskryptory 'M' i 'P' używane są w preferowanych nazwach IUPAC.

Przykład:





(1*E*,1*M*)-cyklookt-1-en (PIN)
(*E*,*M*)-cyklookten
(*E*,S_p)-cyklookten

P-93.5.1.4.2 Określanie *egzo*-cyklicznych wiązań podwójnych

P-93.5.1.4.2.1 Opis konfiguracji przy użyciu stereodeskryptorów '*E*' i '*Z*'

Do opisu konfiguracji *egzo*-cyklicznych wiązań podwójnych używa się stereodeskryptorów '*E*' i '*Z*'.

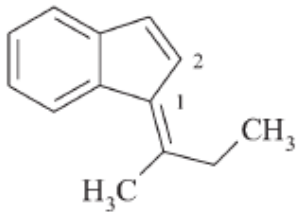
(1) W przypadku obecności jednego podwójnego wiązania w konstruowaniu nazw stosuje się dwie metody

(a) wiązanie podwójne traktuje się jako integralną część struktury macierzystej; stereodeskryptor umieszcza się na początku nazwy podstawnikowej poprzedzając go lokantem wskazującym miejsce połączenia tego wiązania ze strukturą macierzystą;

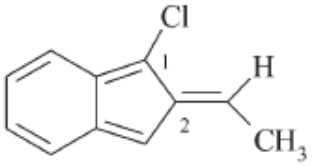
(b) podwójne wiązanie traktuje się jako część podstawnika typu 'yliden'. Stereodeskryptor (bez lokantu) umieszcza się na początku nazwy podstawnika; przedrostek umieszcza się w nawiasie okrągłym lub innym w zależności od potrzeby (zgodnie z zasadami podanymi w P-93.2.1).

Metoda (a) generuje preferowane nazwy IUPAC.

Przykłady:



(1*E*)-1-(butan-2-ylideno)-1*H*-inden (PIN)
1-[(1*E*)-butan-2-ylideno]-1*H*-inden

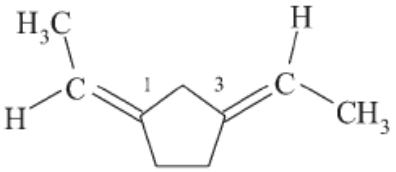


(2*E*)-1-chloro-2-etylideno-2*H*-inden (PIN)
1-chloro-2-[(2*E*)-etylideno]-*2H*-inden

(2) Gdy do tego samego pierścienia przyłączone są dwa podwójne wiązania stosuje się dwie metody opisane w punkcie (1). W preferowanej nazwie IUPAC każde wiązanie podwójne wymienia się przy użyciu metody (a). W nomenklaturze ogólnej używana jest także trzecia metoda, w której pierścień traktowany jest formalnie jak wiązanie podwójne, a cały układ opisuje się tak, jak kumulen o parzystej liczbie podwójnych wiązań (patrz P-93.4.2.3). Metodę

tę można stosować tylko wtedy, gdy podwójne wiązania i pierścień tworzą układ liniowy. Układy kątowe opisuje się za pomocą metody (a).

Przykład 1:

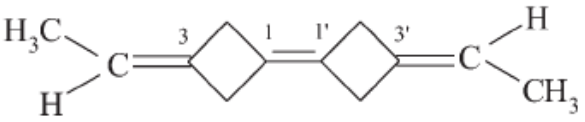


(1*Z*,3*E*)-1,3-dietylidenocyklopentan (PIN)

Przykład 2:

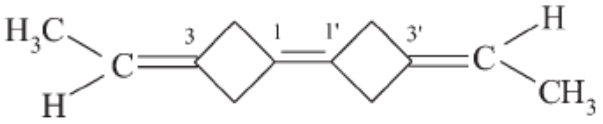
(1*Z*,4*Z*)-1,4-dietylidenocykloheksan (PIN)
(patrz przykład 1 w P-92.4.2.2 przy opisie konfiguracji ‘*Z*’ na centrum ‘C-1’ i ‘C-4’)
cis-1,4-dietylidenocykloheksan
1,4-di[(1*Z*)-etylideno]cykloheksan

Przykład 3:

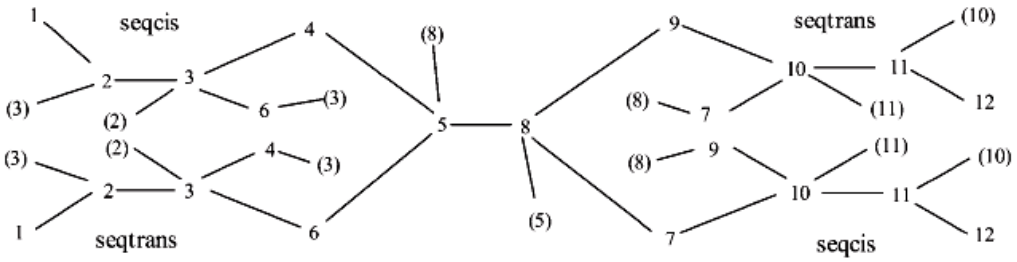


[1(1′)*E*,3E,3’*E*]-3,3′-dietylideno-1,1′-bi(cyklobutyliden) (PIN)
trans-3,3′-dietylideno-1,1′-bi(cyklobutyliden)
3,3′-di[(*E*)-etylideno]-1,1′-bi(cyklobutyliden)

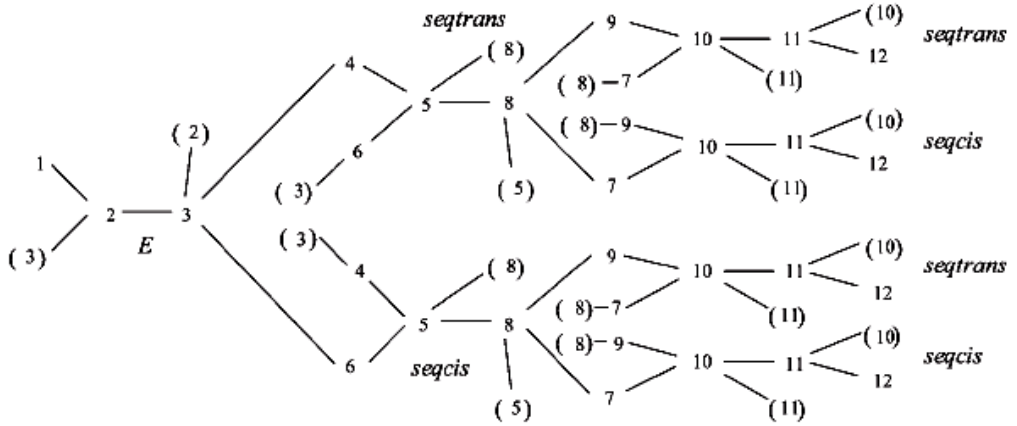
Wyjaśnienie:



umownie ponumerowana struktura w celu uzyskania potrzebnego digrafu:



uproszczony digraf dla centrów 5 i 8 w ponumerowanej strukturze



uproszczony digraf dla centrów 2 i 3 w ponumerowanej strukturze

P-93.5.1.4.2.2 Opis konfiguracji *egzo*-cyklicznych podwójnych wiązań przy użyciu stereodeskryptorów innych niż '*E*' i '*Z*'.

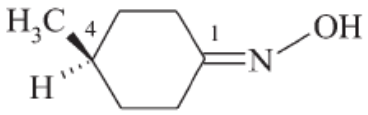
Związki złożone z podstawionego pierścienia i *egzo*-cyklicznego wiązania podwójnego mogą być traktowane jako układ allenu i nazywane w dwojaki sposób:

(1) identyfikując i opisując poszczególne jednostki stereogeniczne

(2) rozpatrując całą cząsteczkę jako specyficzny układ i stosując odpowiednie w tym przypadku nazewnictwo

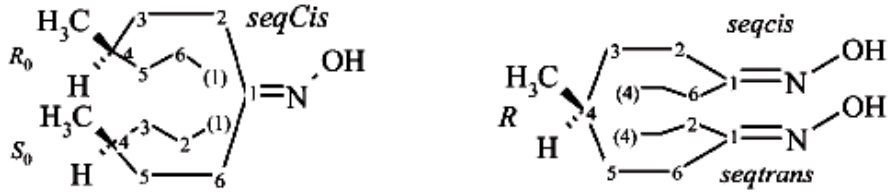
Nazwy IUPAC tworzy się w oparciu o metodę (1)

Przykład 1:



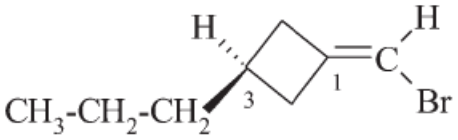
N-[(1*seqCis*,4*R*)-4-metylocykloheksylideno]hydroksyloamina (PIN)
[dla '*seqCis*' patrz P-92.1.1(f)]
(*M*)-(4-metylocykloheksylideno)hydroksyloamina
oksym (R_a)-4-metylocykloheksanonu

Wyjaśnienie: Do opisu konfiguracji centrów: 'C-1' i 'C-4' stosuje się następujące digrafy :



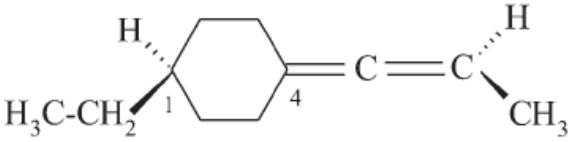
C-1 uproszczone digrafy C-4

Przykład 2:



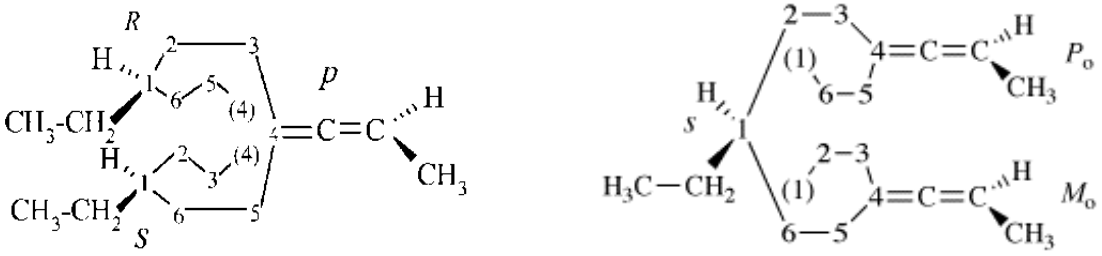
(1*seqCis*,3*S*)-1-(bromometylideno)-3-propylocyklobutan (PIN)
(3*P*)-1-(bromometylideno)-3-propylocyklobutan

Przykład 3:



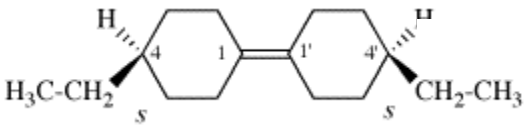
(1*s*,4*p*)-1-etylo-4-(prop-1-en-1-etylideno)cykloheksan (PIN)
(1*s*,4s_a)-1-etylo-4-(prop-1-en-1-etylideno)cykloheksan

Wyjaśnienie: Do opisu konfiguracji centrów ‘C-1’ i ‘C-4’ stosuje się następujące digrafy:



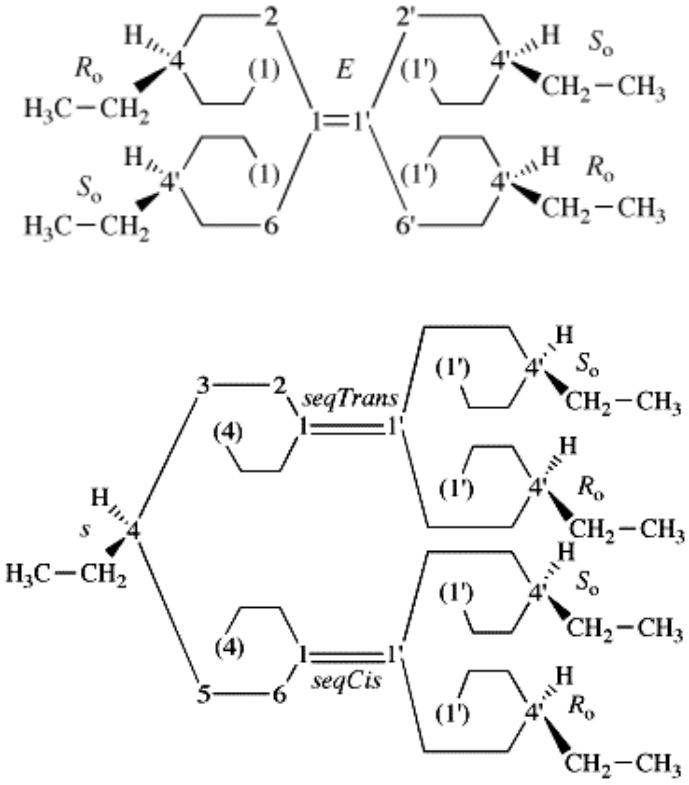
C-4 uproszczone digrafy C-1

Przykład 4:



(4*s*,4′*s*)-4,4′-dietylo-1,1′-bi(cykloheksyliden) (PIN)
cis-4,4′-dietylo-1,1′-bi(cykloheksyliden)

Wyjaśnienie: Do opisu konfiguracji stereogenicznych wiązań podwójnych i stereogenicznego centrum ‘C-4’ stosuje się następujące digrafy:



uproszczone digrafy

Wyjaśnienie: Konfiguracja podwójnego wiązania ‘C-1=C-1′’ ustalana jest w następujący sposób: wprowadza się pomocnicze stereodeskryptory po obu stronach podwójnego wiązania: ‘R_0’ i ‘S_0’; to ustala priorytet ‘R_0’ nad ‘S_0’, co z kolei pozwala stwierdzić, że ligandy ‘2’ i ‘6′ ‘ implikują konfigurację ‘*E*’. Konfigurację centrum ‘C-4’ określa się następująco: konfiguracje ‘R_0’ i ‘S_0’ pozwalają w każdej z gałęzi oznaczyć konfigurację podwójnych wiązań ‘C-1=C-1′’ za pomocą pomocniczych stereodeskryptorów ‘*seqCis*$_0$‘ i ‘*seqTrans*$_0$’; z uwagi na warunkowany regułą sekwencji 5 priorytet konfiguracji ‘*seqCis*$_0$’, ligand ‘C-4’ zyskuje pierwszeństwo przed ligandem ‘C-3’, co z kolei pozwala na przyporządkowanie badanemu centrum (na podstawie reguły sekwencji 5) konfiguracji ‘*s*’. Należy zauważyć, że chociaż podstawniki mają uporządkowanie *cis*, to stereodeskryptory CIP zawierają *E*, który sam nie może być użyty do opisu konfiguracji powyższej struktury.

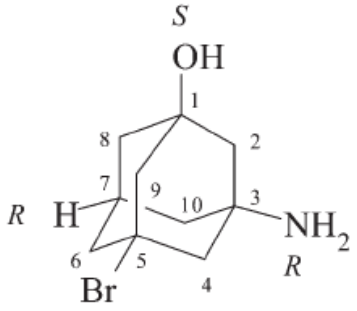
P-93.5.2 Związki von Baeyera

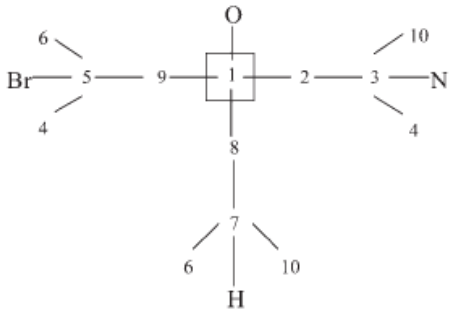
P-93.5.2.1 Opis centrów stereogenicznych za pomocą stereodeskryptorów CIP
P-93.5.2.2 Opis konfiguracji względnej: deskryptory ‘*endo*’, ‘*egzo*’, ‘*syn*’, ‘*anti*’, ‘*cis*’ i ‘*trans*’
P-93.5.2.3 Opis podwójnych wiązań

P-93.5.2.1 Opis centrów stereogenicznych za pomocą stereodeskryptorów CIP

Konfiguracja absolutna ze specyficzną numeracją właściwą dla rozpatrywanej struktury opisywana jest przy użyciu stereodeskryptorów takich, jak ‘*R*’, ‘*s*’ itd.

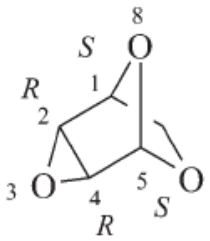
Przykłady:



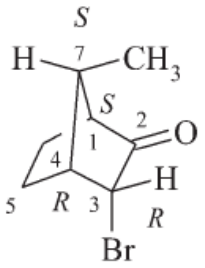


uproszczony digraf

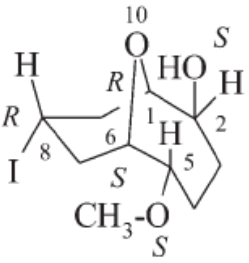
(1*S*,3*R*,5*R*,7*R*)-3-amino-5-bromoadamantan-1-ol (PIN)
(1*S*,3*R*,5*R*,7*R*)-3-amino-5-bromotricyklo[3.3.1.1^{3,7}]dekan-1-ol



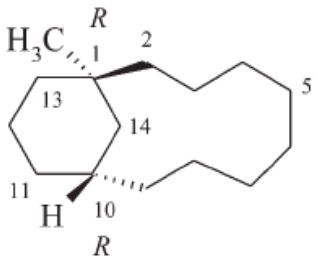
(1*S*,2*R*,4*R*,5*S*)-3,6,8-trioksatricyklo[3.2.1.0^{2,4}]oktan (PIN)



(1*S*,3*R*,4*R*,7*S*)-3-bromo-7-metylobicyklo[2.2.1]heptan-2-on (PIN)



(1*R*,2*S*,5*S*,6*S*,8*R*)-8-jodo-5-metoksy-10-oksabicyklo[4.3.1]dekan-2-ol (PIN)



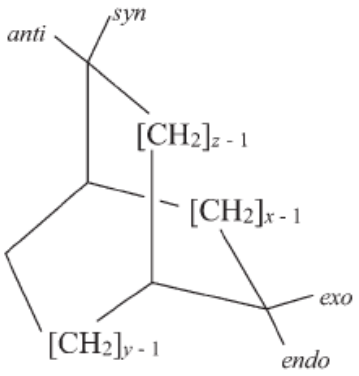
(1*R*,10*R*)-1-metylobicyklo[8.3.1]tetradekan (PIN)

P-93.5.2.2 Konfiguracja względna

Względna konfiguracja i racematy opisuje się przy użyciu stereodeskryptorów '*R*' i '*S*' oraz przedrostków '*rel*' i '*rac*', jak opisano w P-91.2.1.1.

P-93.5.2.2.1 Stereodeskryptory '*endo*', '*egzo*', '*syn*' i '*anti*'

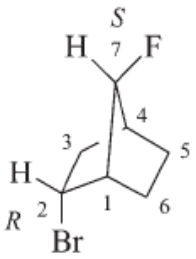
Stereodeskryptory te używane są do określania względnej orientacji grup przyłączonych do niewęzlowych atomów w bicyklo[*x.y.z*]alkanach, gdzie 'x ≥ y > z > 0', z dodatkowym zastrzeżeniem, że dla dwóch pierwszych mostków 'x + y' musi być mniejsze od 7. W rzeczywistości, stereodeskryptory te używane są do opisu względnej konfiguracji układów bi- oraz tricyklicznych takich jak pochodne bicyklo[2.2.1]heptanu, bicyklo[3.2.1]oktanu i bicyklo[3.3.1]nonanu.



Gdy podstawnik zorientowany jest w stronę najwyżej ponumerowanego mostka (mostek 'z' np. 'C-7' w przykładzie podanym niżej) dodaje się deskryptor '*egzo*', jeżeli zaś zorientowany jest w przeciwną stronę – dodaje się deskryptor '*endo*'. Gdy podstawnik przyłączony jest do najwyżej numerowanego mostka i zorientowany jest w kierunku mostka numerowanego najniżej (mostek 'x', np. 'C-2' w podanym niżej przykładzie) dodaje się deskryptor '*syn*', jeżeli zaś w zorientowany jest w przeciwną stronę – deskryptor '*anti*'. W nazwie związku deskryptory te umieszczane są między lokantem i nazwą podstawnika wraz z łączącymi je z tymi nazwami myślnikami.

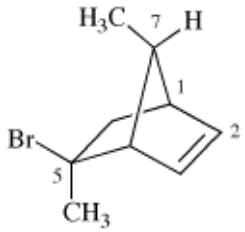
Stereodeskryptory '*endo*', '*egzo*', '*syn*' i '*anti*' opisują jedynie konfigurację względną; nie pozwalają one na rozróżnienie pojedynczych enancjomerów (patrz pierwszy przykład podany niżej) i racematów (drugi przykład podany niżej); aby zwrócić uwagę na te dwie możliwości używa się frazy: 'i/lub enancjomer'. Konfigurację absolutną trzeba opisywać przy użyciu stereodeskryptorów CIP takich jak '*R*' i '*S*'; Stereodeskryptory te w połączeniu z przedrostkami '*rel*' i '*rac*' umożliwiają pełny opis dowolnego rozpatrywanego związku.

Przykłady:



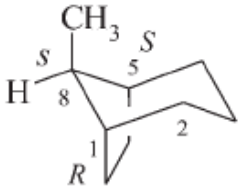
lub enancjomer

2-*endo*-bromo-7-*anti*-fluorobicyklo[2.2.1]heptan
rel-(1*S*,2*R*,4*S*,7*S*)-2-bromo-7-fluorobicyklo[2.2.1]heptan (PIN)

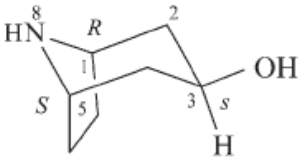


i enancjomer

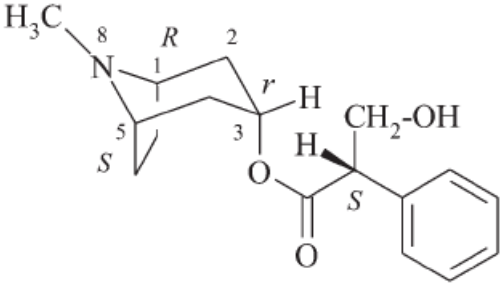
(±)-5-*egzo*-bromo-5-*endo*,7-*anti*-dimetylobicyklo[2.2.1]hept-2-en
rac-(1*R*,4*S*,5*S*,7*R*)-5-bromo-5,7-dimetylobicyklo[2.2.1]hept-2-en (PIN)



8-*syn*-metylobicyklo[3.2.1]oktan
(1*R*,5*S*,8*s*) -8-metylobicyklo[3.2.1]oktan (PIN)



(1*R*,3*s*,5*S*)-8-azabicyklo[3.2.1]oktan-3-ol
(3*s*)-8-nortropan-3-ol
8-azabicyklo[3.2.1]oktan-3-*egzo*-ol

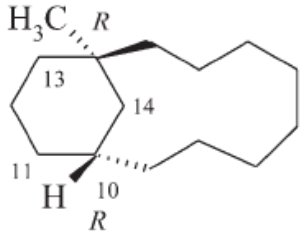


(2*S*)-2-fenylo-3-hydroksypropanian (1*R*,3*r*,5*S*)-8-metylo-8-azabicyklo[3.2.1]oktan-3-ylu
(2*S*)-2-fenylo-3-hydroksypropanian 8-metylo-8-azabicyklo[3.2.1]heptan-3-*endo*-ylu
(2*S*)-2-fenylo-3-hydroksypropanian tropan-3α-ylu (patrz P-101.7.3)

P-93.5.2.2.2 Stereodeskryptory ‘*cis*’ i ‘*trans*’

Stereodeskryptorów ‘*cis*’ i ‘*trans*’ można używać w nomenklaturze ogólnej tylko do opisu ułożenia ligandów ‘*cis*’ lub ‘*trans*’ w pozycjach węzłowych. Stereodeskryptory CIP poprzedzone przedrostkiem ‘*rel*’ używane są w połączeniu z preferowanymi nazwami IUPAC.

Przykład:



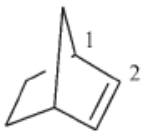
lub enancjomer

rel-(1*R*,10*R*)-1-metylobicyklo[8.3.1]tetradekan (PIN)
(1*R**,10*R**)-1-metylobicyklo[8.3.1]tetradekan
1-metylo-*trans*-bicyklo[8.3.1]tetradekan

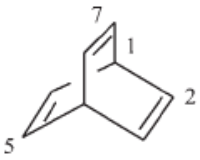
P-93.5.2.2.2 Opis podwójnych wiązań

Zgodnie z podaną wcześniej uwagą dotyczącą cykloalkanów (patrz P-93.5.1.4.1), w nienasyconym bicyklo[3.3.3]undekanie oraz mniejszych układach, nie jest konieczne podawanie konfiguracji ‘*Z*’ wiązań podwójnych. Natomiast wszystkie wiązania podwójne w układach większych muszą być opisywane stereodeskryptorami ‘*Z*’ lub ‘*E*’.

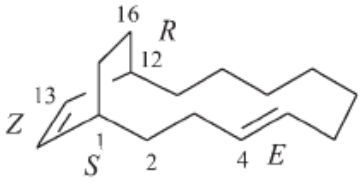
Przykłady:



bicyklo[2.2.1]hept-2-en (PIN)



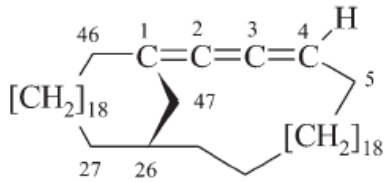
bicyklo[2.2.2]okta-2,5,7-trien (PIN)



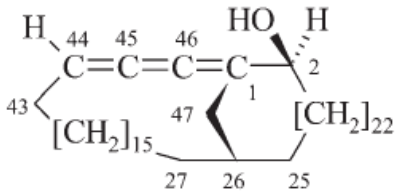
(1*S*,4*E*,12*R*,13*Z*)bicyklo[10.2.2]heksadeka-4,13-dien (PIN)

Układy kumulenowe zawarte w układach cyklicznych traktuje się w sposób opisany w P-93.4.2 i P-93.4.2.3 i numerację prowadzi się zgodnie z zasadami numerowania układów cyklicznych. W nazwach podaje się pierwszy lokant z systemu nazewnictwa ‘*E*/*Z*’ lub lokant jednostki stereogenicznej (system ‘*M*/*P*’). Inne lokanty (patrz rozdziały P-14.3 i P-31.1.1.1) podaje się wówczas, gdy lokanty poszczególnych wiązań podwójnych różnią się od siebie więcej niż o jednostkę.

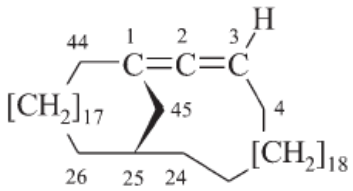
Przykłady:



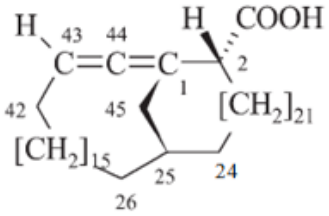
(1*Z*,26*R*)-bicyklo[24.20.1]heptatetrakonta-1,2,3-trien (PIN)



[2*S*,26*R*,1(44)*E*]-bicyklo[24.20.1]heptatetrakonta-1(46),44,45-trien-2-ol (PIN)



(1*P*,25*R*)-bicyklo[23.19.1]pentatetrakonta-1,2-dien (PIN)



kwas [1(43)*P*,2*R*,25*R*]-bicyklo[23.19.1]pentatetrakonta-1(44),43-dieno-2-karboksylowy (PIN)

P-93.5.3 Spirozwiązki

P-93.5.3.1 Opis stereogenicznych atomów spiro typu ‘Xabcd’, gdzie ‘a’ > ‘b’ > ‘c’ > ‘d’

P-93.5.3.1 Opis stereogenicznych atomów spiro typu ‘Xabab’, gdzie ‘a’ > ‘b’

P-93.5.3.1 Opis podwójnych wiązań

P-93.5.3.1 Opis nietetraedrycznych centrów stereogenicznych

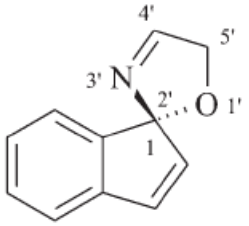
P-93.5.3.1 Chiralność aksjalna spirozwiązków

P-93.5.3.1 Opis stereogenicznych atomów spiro typu ‘Xabcd’, gdzie ‘a’ > ‘b’ > ‘c’ > ‘d’

Stereodeskryptorów ‘*R*’ i ‘*S*’ używa się wówczas, gdy atom spiro ‘X’ otoczony jest przez cztery atomy uporządkowane w kolejności: ‘a > b > c > d’. Są one preferowane w stosunku do stereodeskryptorów ‘*cis*’ i ‘*trans*’, które mogą być użyte do opisu względnej konfiguracji pierścieni w

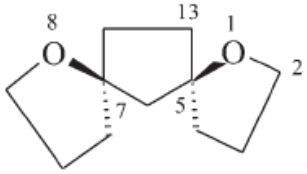
dispirozwiązkach. Konfigurację centrów chiralnych zlokalizowanych w szkielecie spirozwiązku opisuje się przy użyciu stereodeskryptorów '*R*' i '*S*' , stosując znane zasady.

Przykład 1:



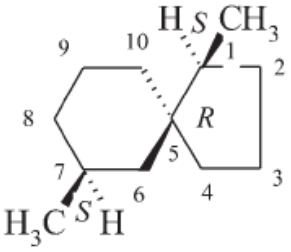
(1*R*)-5′*H*-spiro[indeno-1,2′-[1,3]oksazol] (PIN)

Przykład 2:



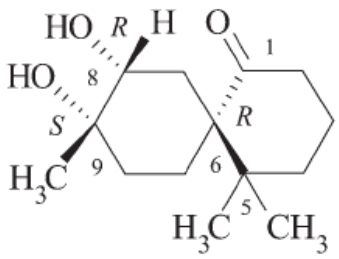
(5*R*,7*S*)-1,8-dioksadispiro[4.1.4^{7}.2^{3}]tridekan (PIN)
cis-1,8-dioksadispiro[4.1.4^{7}.2^{3}]tridekan
(stereodeskryptorów "*cis*' i "*trans*' używa się analogicznie jak dla dwupodstawionych związków monocyklicznych opisanych w P-93.5.1.2)

Przykład 3:

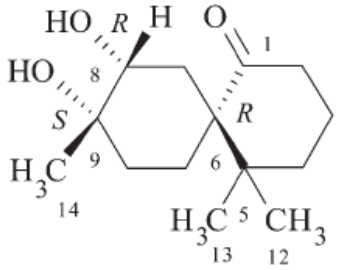


(1*S*,5*R*,7*S*)-1,7-dimetylospiro[4.5]dekan (PIN)

Przykład 4:



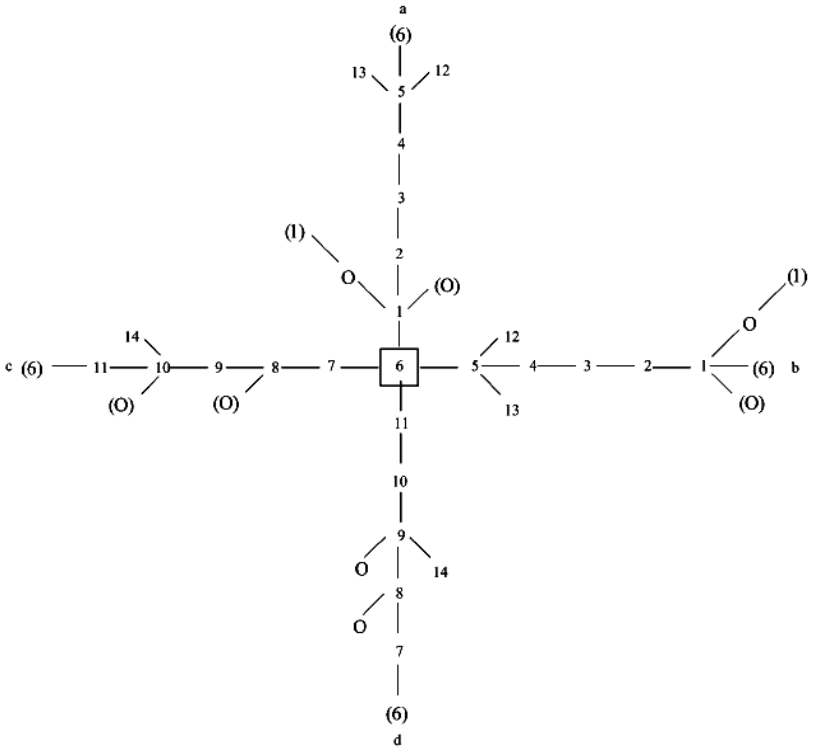
numeracja do nazewnictwa



numeracja do uproszczonego digrafu

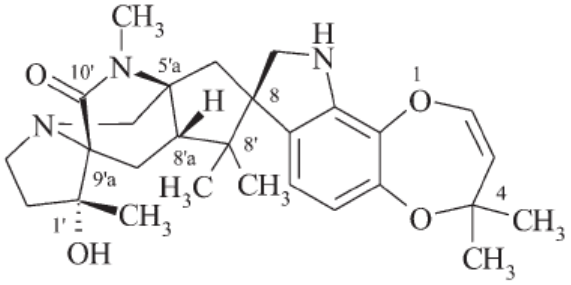
(6*R*,8*R*,9*S*)-8,9-dihydroksy-5,5,9-trimetylospiro[5.5]undekan-1-on (PIN)

Wyjaśnienie:



uproszczony digraf

Przykład 5:

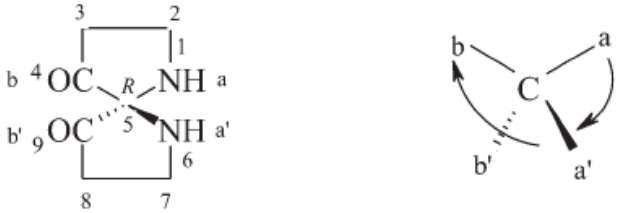


(1′*R*,5′a*S*,7′*R*,8′a*S*,9′a*R*)-1′-hydroksy-1′,4,4,8′,8′,11′-heksametylo-2′,3′,8′a,9,9′,10-heksahydro-1′*H*,4*H*,5′*H*,6′*H*,8′*H*-spiro[[1,4]dioksepino[2,3-g]indol-8,7′-[5a,9a](epiiminometano)cyklopenta[*f*]indolizyn]-10′-on (PIN)

P-93.5.3.1 Opis atomów spiro typu ‘Xabab’, gdzie ‘a’ > ‘b’

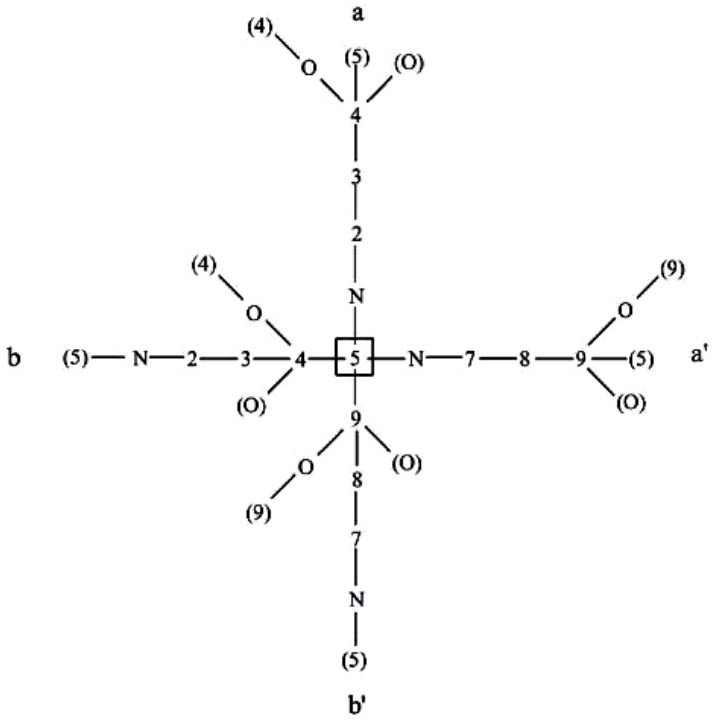
Ogólna metodologia stosowana w takich układach przy opisie konfiguracji atomu centralnego jest zilustrowana niżej.

Przykład 1:



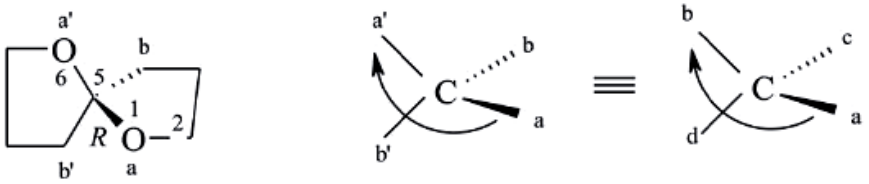
(5*R*)-1,6-diazaspiro[4.4]nonano-4,9-dion (PIN)

Wyjaśnienie: W tym przykładzie [patrz 2.5, poz.(34)], analiza mająca na celu określenie pierwszeństwa ligandów w równoważnych parach ‘a’/’a′ ’ i ‘b’/’b′ ’, gdzie ‘a’ > ‘b’, rozpoczyna się na atomie azotu o numerze 1 a potem przenosi się na atom azotu o numerze 6; analiza ta szereguje obie grupy ‘a’ przed grupami ‘b’. Następny ligand trzeba wybrać spośród ‘b’ i ‘b′ ‘; jak to wynika z podanego niżej digrafu, trzeba wybrać tę gałąź, która zawiera atom azotu wcześniej wybrany jako pierwszy (tzn. ‘a’ ma pierwszeństwo przed ‘a′ ’); ten wybór szereguje tym samym atomy węgla i ustala ranking: ‘b’ > ‘b′ ’. Tym samym szereg a > a′ > b > b′ pozwala przypisać atomowi spiro ‘C-5’ konfigurację ‘*R*’.



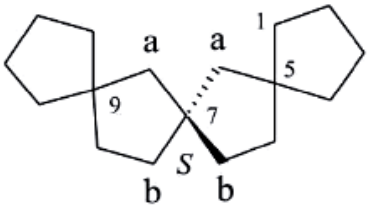
uproszczony digraf

Przykład 2:



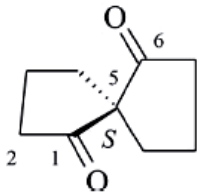
(5*R*)-1,6-dioksaspiro[4.4]nonan (PIN)

Przykład 3:



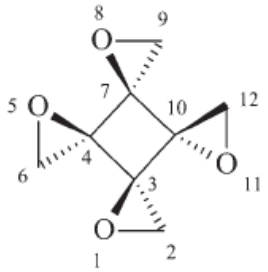
(7*S*)-trispiro[4.1.1.4^{9}.2^{7}.2^{5}]heptadekan (PIN)

Przykład 4:



(5*S*)-spiro[4.4]nonano-1,6-dion (PIN)

Przykład 5:



(3*R*,4*s*,7*S*,10*s*)-tetraoksatetraspiro[2.0.2^{4}.0.2^{7}.0.2^{10}.0^{3}]dodekan (PIN)
(1*r*,5*c*,8*c*,11*t*)-tetraoksatetraspiro[2.0.2^{4}.0.2^{7}.0.2^{10}.0^{3}]dodekan

Uwaga: W tym przykładzie występują centra stereogeniczne i pseudoasymetryczne. Konieczne jest tu zastosowanie reguł sekwencji **4** i **5**.

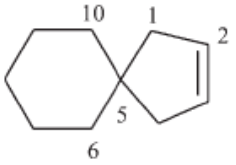
Wyjaśnienie:

(a) numeracji dokonuje się tak, aby w pierwszym miejscu wystąpienia różnicy preferowała ona ułożenie '*cis*'; patrz P-14.4(j); tym samym prawidłowo jest '1*r*,5*c*,8*c*,11*t*' a nie '1*r*,5*t*,8*c*,11*c*';
(b) konfiguracje na atomach 'C-3' i 'C-7' określa się w oparciu o regułę sekwencji **4**, *podobne* poprzedza *niepodobne* – stosownie do metodologii opisanej w P-92.5;
(c) konfiguracje na atomach 'C-4' i 'C-10' określa się w oparciu o regułę sekwencji **5**, '*R*' poprzedza '*S*' [jak stwierdzono w punkcie (b)] – stosownie do metodologii opisanej w P-92.6.

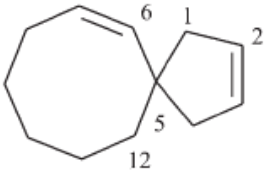
P-93.5.3.3 Opis podwójnych wiązań

Gdy jednostka stereogeniczna występuje w pierścieniu mniejszym niż ośmioczłonowy, nie ma potrzeby używania deskryptora '*E*' lub '*Z*'. Stereodeskryptorów używa się tylko wtedy, gdy w cząsteczce występuje większy pierścień.

Przykłady:



spiro[4.5]dek-2-en (PIN)

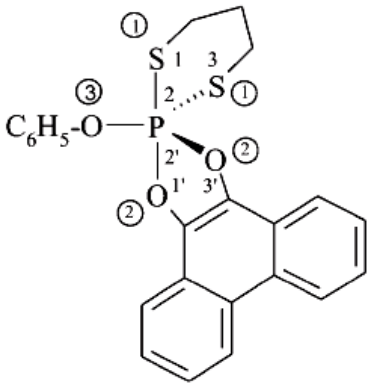


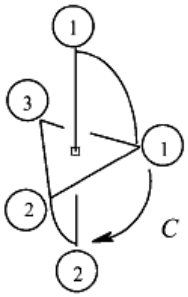
(2*Z*,6*Z*)-spiro[4.7]dodeka-2,6-dien (PIN)

P-93.5.3.4 Opis nietetraedrycznych jednostek stereogenicznych

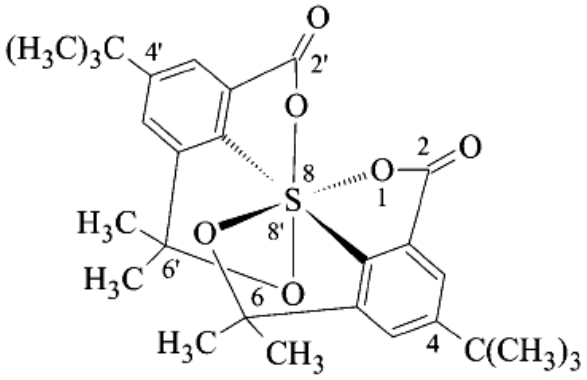
Opis względnej i absolutnej konfiguracji spirozwiązków zawierających λ^{4}-, λ^{5} i λ^{6}-heteroatomy spiro dokonuje się za pomocą stereodeskryptorów '*A*' i '*C*' stosowanych w chemii koordynacyjnej (opisanych w P-93.3.4.2).

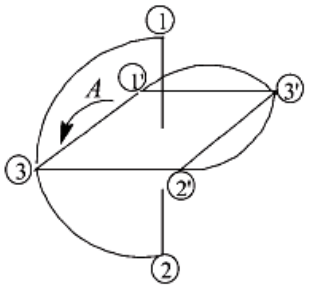
Przykłady:





(*TBPY*-5-12-*C*)-2-fenoksy-2λ^{5}-spiro[1,3,2-ditiafosfinano-2,2′-fenantro[9,10-*d*][1,3,2]dioksafosfol] (PIN)



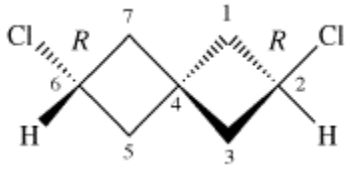


(*OC*-6-22′-*A*)-4,4′-di-*tert*-butylo-6,6,6′,6′-tetrametylo-2*H*,2′*H*,6*H*,6′*H*-8λ^{6},8′-spirobi[[1,2]oksatiolo[4,3,2-*hi*][2,1]benzooksatiolo]-2,2′-dion (PIN)
(patrz P-93.3.3.7)

P-93.5.3.5 Chiralność aksjalna spirozwiązków

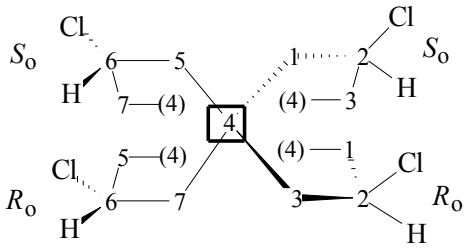
Do opisu chiralności spirozwiązków stosuje się stereo deskryptory '*M*' i '*P*'. Można także używać stereodeskryptory '*R*' i '*S*' do opisu obecnych w cząsteczce centrów chiralności. Stereodeskryptory '*R*' i '*S*' używa się w preferowanych nazwach IUPAC.

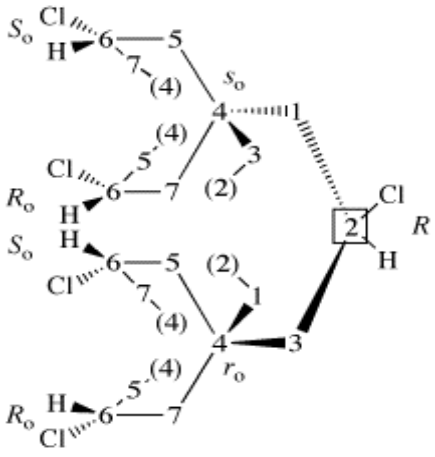
Przykład 1:

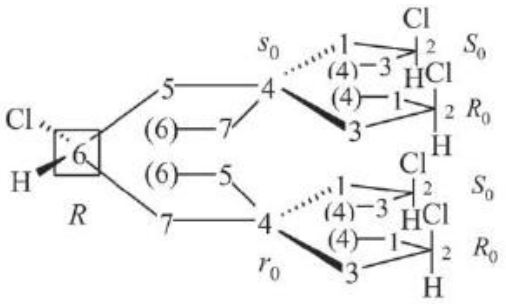


(2*R*,6*R*)-2,6-dichlorospiro[3.3]heptan (PIN)
(2*P*)- 2,6-dichlorospiro[3.3]heptan

Wyjaśnienie:

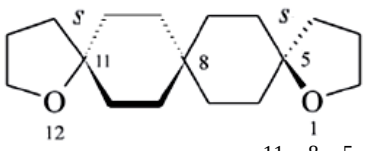






uproszczone digrafy

Przykład 2:



(5*s*,11*s*)-1,12-dioksatrispiro[4.2.2.4^{11}.2^{8}.2^{5}]nonadekan (PIN)
(atom spiro 8 jest niestereogeniczny)
(5*M*)-1,12-dioksatrispiro[4.2.2.4^{11}.2^{8}.2^{5}]nonadekan

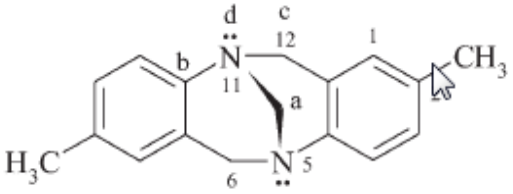
P-93.5.4 Związki skondensowane i mostkowe skondensowane

P-93.5.4.1 Opis konfiguracji za pomocą stereodeskryptorów CIP
P-93.5.4.2 Deskryptory '*cisoid*' i '*transoid*'

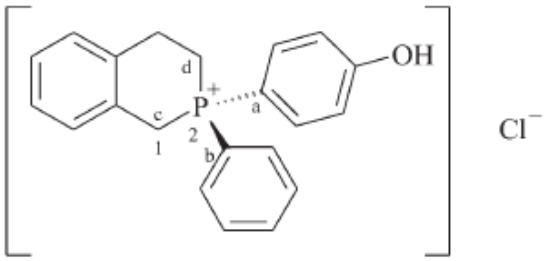
P-93.5.4.1 Opis konfiguracji za pomocą stereodeskryptorów CIP

Dużą różnorodność skondensowanych i mostkowych skondensowanych związków karbo- i heterocyklicznych odzwierciedla opis ich jednostek stereogenicznych, takich jak '*R*', '*S*', '*r*', '*s*', '*M*' i '*P*'. Kilka przykładów ilustruje chiralność związaną z atomem węgla i heteroatomami.

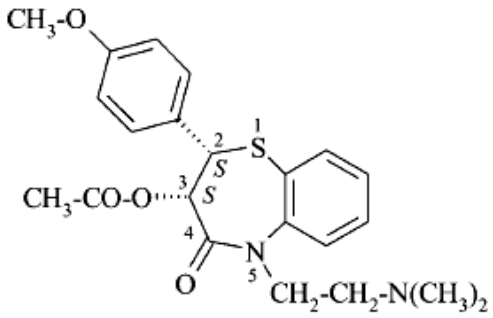
Przykłady:



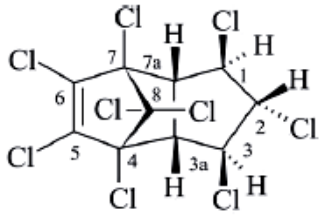
(5*S*,11*S*)-2,8-dimetylo-6*H*,12*H*-5,11-metanodibenzo[b,f][1,5]diazocyn (PIN)



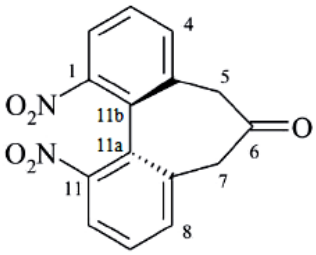
chlorek (2*S*)-2-fenylo-2-(4-hydroksyfenylo)1,2,3,4-tetrahydroizofosfinolin-2-ium (PIN)



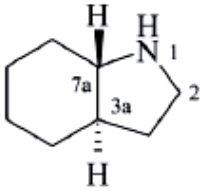
octan (2*S*,3*S*)-5-(dimetyloamino)etylo-2-(4-metoksyfenylo)-4-okso-2,3,4,5-tetrahydro-1,5-benzotiazepin-3-ylu (PIN)



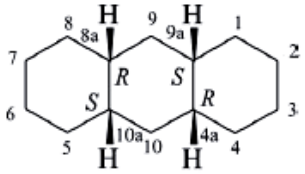
(1*R*,2*r*,3*S*,3a*R*,4*S*,7*R*,7a*S*)-1,2,3,4,5,6,7,8,8-nonachloro-2,3,3a,4,7,7a-heksahydro-4,7-metano-1*H*-inden (PIN)



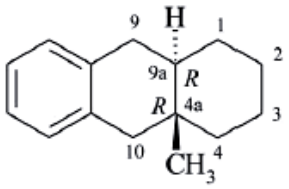
(11a*M*)-1,11-dinitro-5,7-dihydrodibenzo[*a*,*c*][7]annulen-6-on (PIN)
(11aR_a)- 1,11-dinitro-5,7-dihydrodibenzo[*a*,*c*][7]annulen-6-on



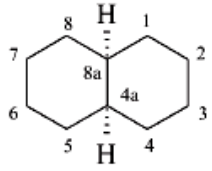
(3a*R*,7a*S*)-oktahydro-1*H*-indol (PIN)
trans-oktahydroindol



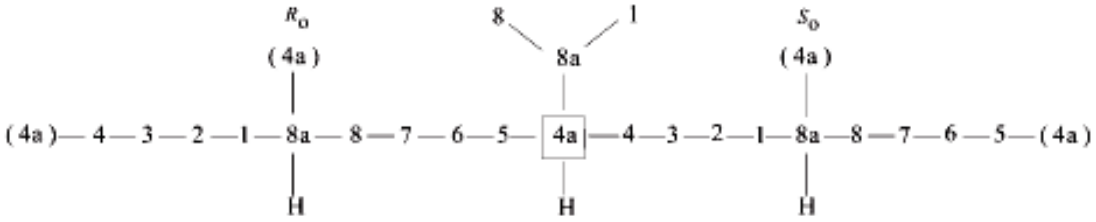
(4a*R*,8a*R*,9a*S*,10a*S*)-tetradekahydroantracen (PIN)



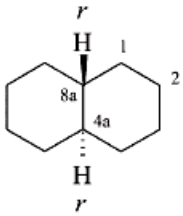
(4a*R*,9a*R*)-4a-metylo-1,2,3,4,4a,9,9a,10-oktahydroantracen (PIN)



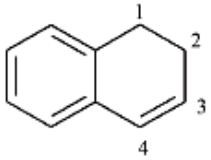
(4a*s*,8a*s*)-dekahydronaftalen (PIN)
cis-dekahydronaftalen



uproszczony digraf uzasadniający konfigurację ‘*s*’ w pozycji ‘4a’



(4a*r*,8a*r*)-dekahydronaftalen (PIN)
trans-dekahydronaftalen



1,2-dihydronaftalen (PIN)
(podwójne wiązanie w pozycji ‘C-3’ nie jest oznaczane jako ‘*Z*’; patrz P-93.5.1.4.1)

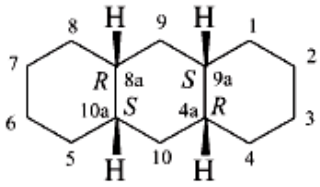
P-93.5.4.2 Deskryptory ‘*cisoid*’ i ‘*transoid*’

Relacje steryczne między więcej niż jedną parą nasyconych atomów węzłowych w układzie skondensowanym określa się deskryptorami ‘*cis*’ i ‘t*rans*’ wraz z następującymi po nich myślnikami oraz – o ile to konieczne – odpowiednim lokantem atomu węzłowego o najniższym numerze z

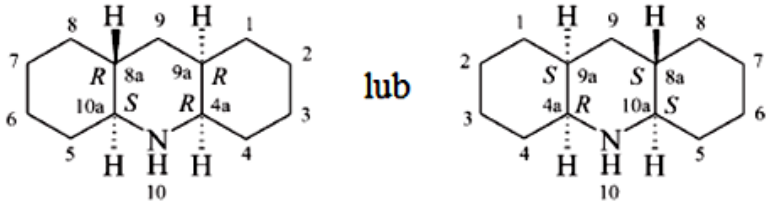
następującym po nim myślnikiem, przy czym całość umieszcza się przed nazwą układu cyklicznego. Steryczne relacje między najbliższymi atomami węzłowych par '*cis*' i '*trans*' opisuje się przy pomocy stereodeskryptorów '*cisoid*' i '*transoid*' z następującymi po nich myślnikami oraz – o ile to konieczne – odpowiednimi lokantami z następującymi po nich drugimi myślnikami przy czym całość umieszcza się między oznaczeniami 'cis' lub 'trans' rozważanych połączeń węzłów. Termin 'najbliższe atomy' dotyczy atomów połączonych ze sobą najmniejszą liczbą atomów niezależnie od numeracji układu. Gdy możliwy jest wybór najbliższych atomów, wybiera się parę zawierającą niżej numerowane atomy.

Dla deskryptorów '*cisoid*' i '*transoid*' nie stosuje się skrótów. Deskryptory te nie są obecnie zalecane. Zamiast tego – do opisu enancjomeru, dla którego znana jest jedynie konfiguracja względna – używa się notacji '*R*' i '*S*' w połączeniu z deskryptorem '*rel*'.

Przykłady:



(4a*R*,8a*R*,9a*S*,10a*S*)-tetradekahydroantracen (PIN)
[*cis*-*cisoid*-*cis*-tetradekahydroantracen]
(związek ten jest achiralny)



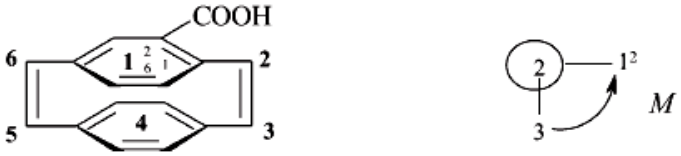
rel-(4a*R*,8a*R*,9a*R*,10a*S*)-tetradekahydroantracen (PIN)
[*cis*-4a-*cisoid*-4a,10a-*trans*-10a-tetradekahydroakrydyna]

P-93.5.5 Cyklofany

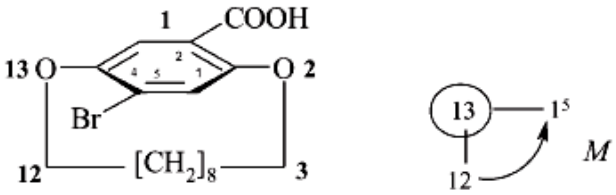
P-95.5.5.1 Opis płaszczyzn stereogenicznych
P-95.5.5.2 Opis centrów chiralnych
P-95.5.5.3 Opis podwójnych wiązań

P-93.5.5.1 Opis płaszczyzn stereogenicznych

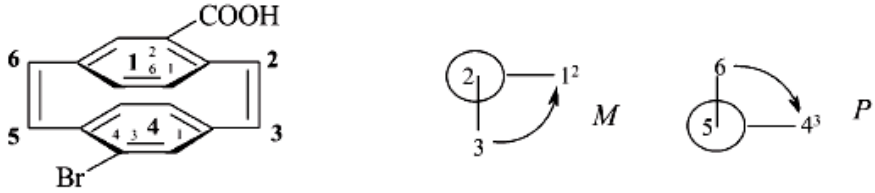
Zgodnie z metodologią opisaną w P-92.1.2.1.3 i P-92.1.2.2.2 deskryptory '*P*' i '*M*' są preferowane w stosunku do 'R_a' i 'S_a'. Gdy istnieje wybór ligandów do określenia sensu chiralności wybiera się jako odnośnik ligand o największym pierwszeństwie według priorytetu CIP. Do opisu jednostki stereogenicznej w cyklofanach, wybiera się lokant złożony pierścienia lub zespołu pierścieni, który jest oglądany z atomu odniesienia; lokant ten umieszcza się przed stereodeskryptorem.



kwas (1^1M)-1,4(1,4)-dibenzenacykloheksafano-1^2-karboksylowy (PIN)
kwas (1^1S_p)-1,4(1,4)-dibenzenacykloheksafano-1^2-karboksylowy



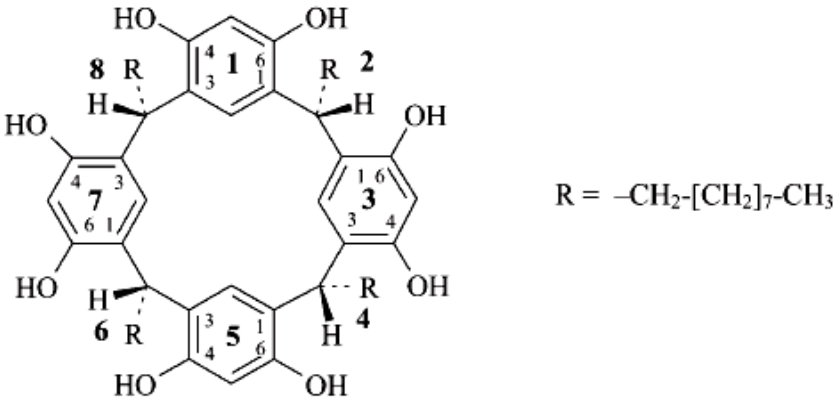
kwas (1^4M)-1^5-bromo-2,13-dioksa-1(1,4)-benzenacyklotridekafano-1^2-karboksylowy (PIN)
kwas (1^4S_p)-1^5-bromo-2,13-dioksa-1(1,4)-benzenacyklotridekafano-1^2-karboksylowy



kwas (1^1M,4^4P)-4^3-bromo-1,4(1,4)-dibenzenacyklofano-1^2-karboksylowy (PIN)
kwas (1^1S_p,4^4R_p)-4^3-bromo-1,4(1,4)-dibenzenacyklofano-1^2-karboksylowy

P-93.5.5.2 Opis centrów chiralnych

Przykłady:

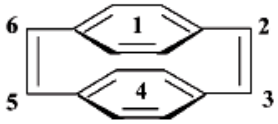


(2*s*,4*s*,6*s*,8*s*)-2,4,6,8-tetranonylo-1,3,5,7(1,3)-tetrabenzenacyklooktafano-1^4,1^6,3^4,3^6,5^4,5^6,7^4,7^6-oktaol (PIN)
2*r*,4*c*,6*c*,8*c*- tetranonylo-1,3,5,7(1,3)-tetrabenzenacyklooktafano-1^4,1^6,3^4,3^6,5^4,5^6,7^4,7^6-oktaol

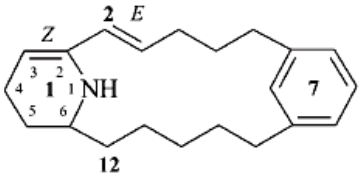
P-93.5.5.3 Opis podwójnych wiązań

Pomijanie stereodeskryptorów '*E*' i '*Z*' przy opisie konfiguracji wiązań podwójnych w cyklofanach uzależnione jest od całkowitej liczby węzłów w układzie. Do siedmiu węzłów deskryptor nie jest konieczny. Gdy w układzie występuje więcej niż siedem węzłów deskryptory muszą być zastosowane.

Przykłady:



1,4(1,4)-dibenzenacykloheksafano-2,5-dien (PIN)



(2E)-1(2,6)-pirydyna-7(1,3)-benzenacyklododekafan-2-en (PIN)

P-93.5.6 Fullereny

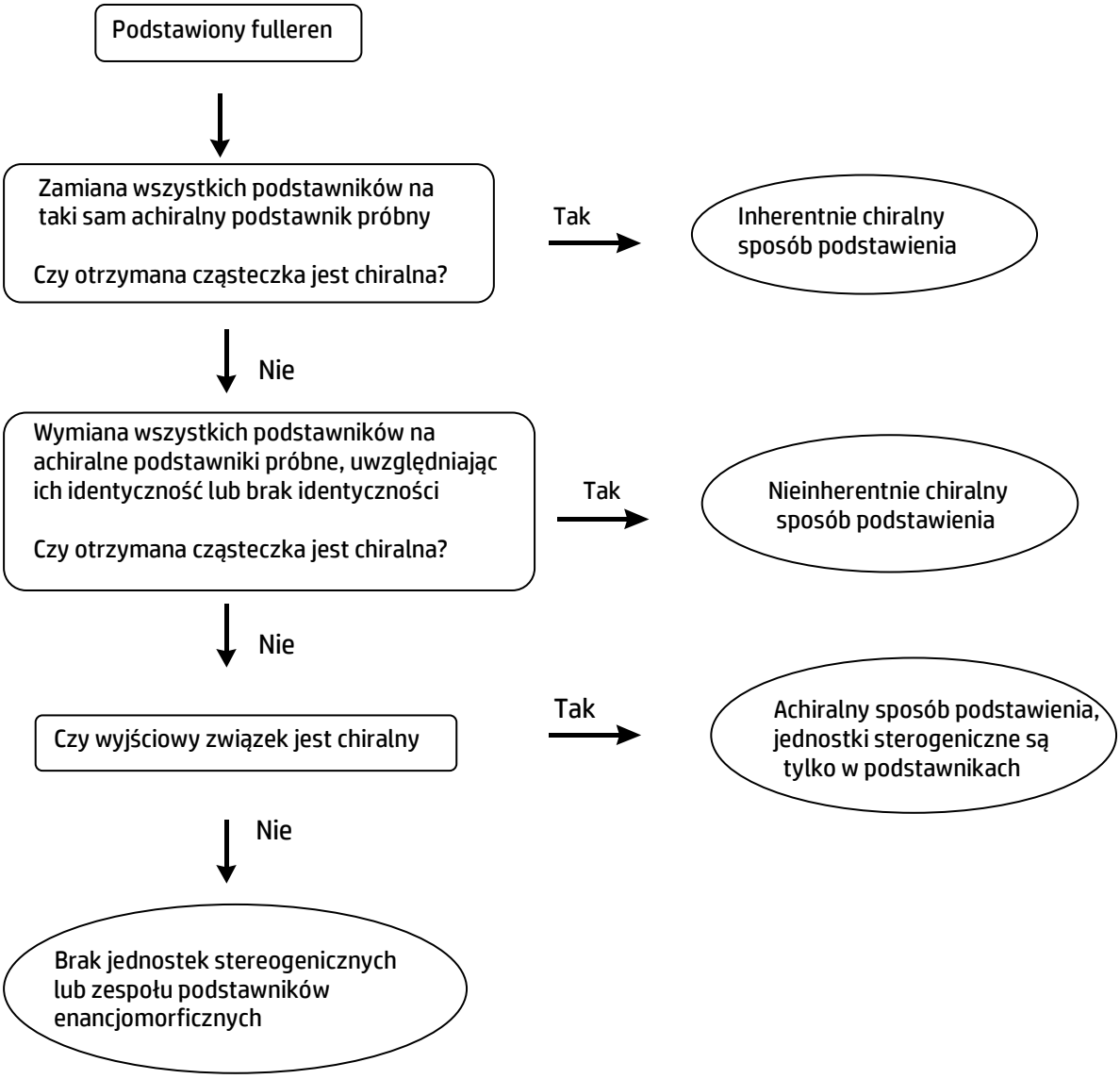
P-93.5.6.1 Definicje i ogólna metodologia

W tym tekście krótko omawia się na przykładach jedynie ogólne zasady opisu konfiguracji fullerenów. Opis stereochemicznej konfiguracji fullerenów jest niezwykle złożony z powodu zróżnicowanych czynników, takich jak numerowanie cząsteczki fullerenu, systematyczne lub zwyczajowe (w niniejszych zaleceniach stosuje się jedynie numerowanie systematyczne omówione w odn. 10,11), natura i charakter podstawników w fullerenie oraz mnogość stereodeskryptorów, których należy użyć do opisu ich pełnej konfiguracji stereochemicznej. Dla pełnego omówienia zagadnienia opisu konfiguracji fullerenu należy sięgnąć do oryginalnej publikacji (rozdział 17 w odn. 10).

W celu opisu stereochemicznej konfiguracji, fullereny i ich pochodne dzieli się na cztery typy w zależności od źródła ich chiralności:

P-93.5.6.2	Typ 1. Inherentnie chiralne macierzyste fullereny;
P-93.5.6.3	Typ 2. Podstawione fullereny o inherentnej chiralności warunkowanej układem podstawników;
P-93.5.6.4	Typ 3. Podstawione fullereny o nieinherentnej chiralności warunkowanej układem podstawników;
P-93.5.6.5	Typ 4. Chiralność wynikająca z chiralności podstawników;
P-93.5.6.6	Nakładanie elementów stereogenicznych w cząsteczce fullerenu

Te cztery typy klasyfikowane są w oparciu o 'test podstawienia', który polega na zamianie podstawników w pojedynczej jednostce fullerenu na 'achiralny podstawnik próbny' 'T' i sprawdzeniu chiralności fullerenu zmodyfikowanego poprzez obecność podstawników 'T' (patrz rys. 9.2)



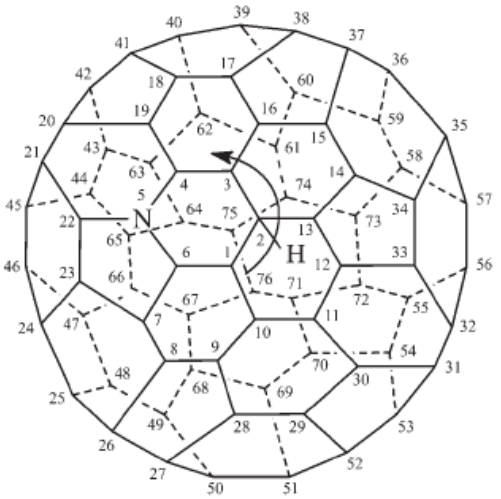
Rys. 9.2 Klasyfikacja chiralności fullerenów według szablonu kolejnych podstawień

P-93.5.6.2 Typ 1. Inherentnie chiralne macierzyste fullereny.

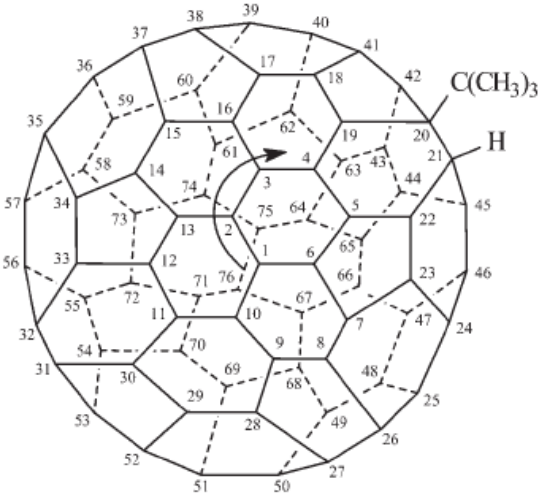
Dwie cząsteczki fullerenu opisane w P-27, (C_{60}-I_h)[5,6]fulleren oraz (C_{76}-$D_{5h(6)}$)[5,6]fulleren są achiralne; nie są one naturalnie chiralne. W przeciwieństwie do nich (C_{76}-D_2)[5,6]fulleren widoczny niżej jest inherentnie chiralny. Numeracja inherentnie chiralnego fullerenu odnosi się do określonego enancjomeru; w drugim enancjomerze numeracja jest lustrzanym odbiciem pierwszej. Opis ręczności (handedness) schematu numeracji wystarcza do jednoznacznego określenia konfiguracji absolutnej fullerenu. Obserwator patrzący na wielościan, w którym numeracja rozpoczyna się z zewnętrznej strony klatki fullerenu, śledzi drogę od ‘C-1’ poprzez ‘C-2’ do ‘C-3’, która nigdy nie jest wyrównana w strukturze fullerenu. Jeżeli droga ta jest zgodna z ruchem wskazówek zegara, konfiguracja opisywana jest przy pomocy stereodeskryptora ‘$^{f,x}C$’, gdzie górny indeks ‘f’ informuje, że deskryptor odnosi się do fullerenu, zaś górny indeks ‘x’ przyjmuje albo wartość ‘s’ dla numeracji systematycznej, albo ‘t’ dla zwyczajowej numeracji opisanej w P-27.3. Gdy droga od ‘C-1’ poprzez ‘C-2’ do ‘C-3’ jest przeciwna do ruchu wskazówek zegara stosuje się stereodeskryptor ‘$^{f,x}A$’. Tak więc fulleren widoczny niżej po lewej stronie opisuje stereodeskryptor ‘$^{f,s}C$’; ma on nazwę: ($^{f,s}C$)-(C_{76}-D_2)[5,6]fulleren.

Fulleren widoczny po prawej stronie ma nazwę: ($^{f,s}A$)-(C_{76}-D_2)[5,6]fulleren. Systematyczne nazewnictwo takich fullerenów stosuje redakcja Chemical Abstracts (odn. 21).

Przykłady:



I



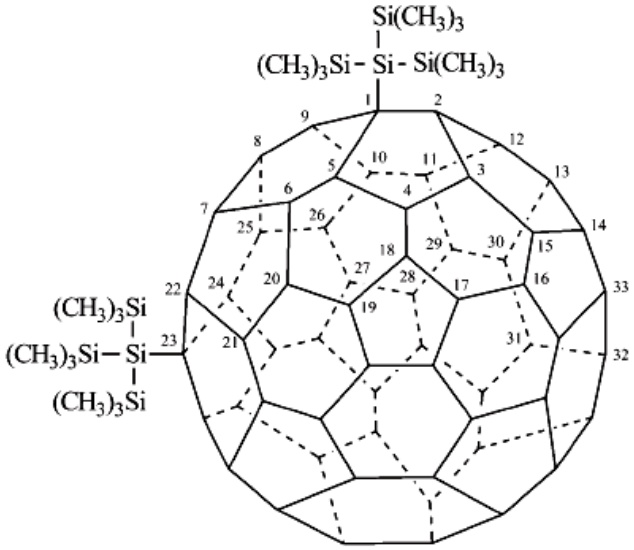
II

I ($^{f,s}A$)-5-aza-(C_{76}-D_2)[5,6]fulleren (PIN)
II ($^{f,s}C$)-20-*tert*-butylo-20,21-dihydro(C_{76}-D_2)[5,6]fulleren (PIN)

P-93.5.6.3 Typ 2. Podstawione fullereny o inherentnej chiralności warunkowanej ułożeniem podstawników

Pochodne achiralnych (lub chiralnych) macierzystych fullerenów, w których obecność podstawników (chiralnych lub achiralnych, różnych lub identycznych) w szkielecie fullerenu generuje chiralny układ podstawników określa się jako fullereny mające inherentnie chiralny układ podstawników. Wszystkie związki fullerenu tego typu są podstawionymi fullerenami achiralnymi. Mają one inherentnie chiralny układ podstawników jeżeli istnienie enancjomerów jest inherentne dla geometrycznego uporządkowania miejsc podstawienia macierzystego fullerenu niezależnie od tego, czy podstawniki są różne, czy identyczne. W takich pochodnych fullerenów stosuje się specyficzny schemat numeracji, który prowadzi do najniższego zestawu lokantów dla podstawników. Jak w P-93.5.6.2 stereodeskryptorami są: '$^{f,x}C$' i '$^{f,x}A$'.

Przykład:



($^{f,s}C$)-1,23-bis[1,1,1,3,3,3-heksametylo-2-(trimetylosililo)trisilan-2-ylo]-1,23-dihydro-(C_{60}-I_h)[5,6]-fulleren (PIN)

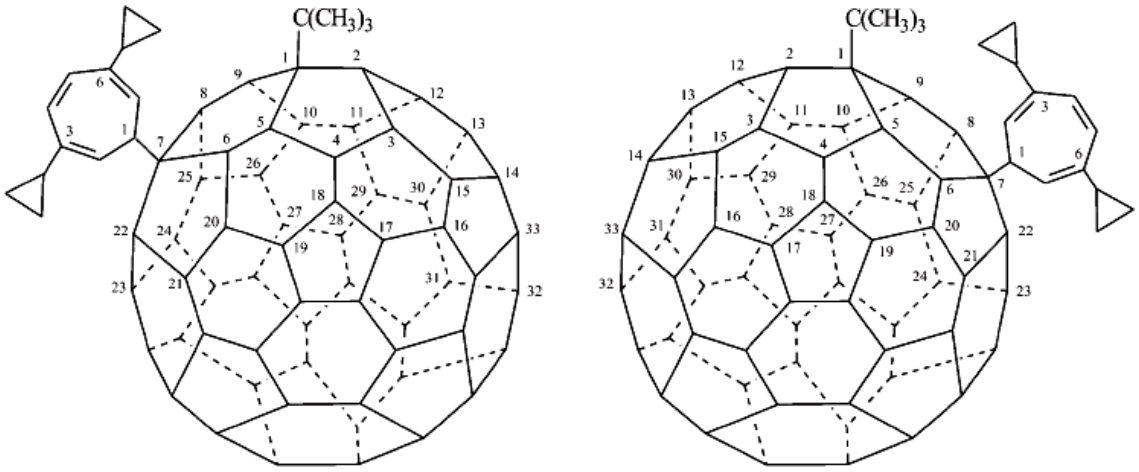
Wyjaśnienie: Stosując numerację zgodną z ruchem wskazówek zegara otrzymujemy lokanty podstawnikow: '1,23'. Przy numeracji przeciwnej do ruchu wskazówek zegara otrzymujemy lokanty '1,29, a ponieważ lokanty '1,23' są niższe niż '1,29' na podstawie reguły mniejszych lokantów (patrz P-14.3.5), więc preferowana jest numeracja zgodna z ruchem wskazówek zegara. W przypadku enancjomeru lokanty '1,23' otrzymuje się w wyniku numeracji przeciwnej do ruchu wskazówek zegara i wówczas należy użyć deskryptora ($^{f,s}A$).

P-93.5.6.4 Typ 3. Podstawione fullereny o nieinherentnej chiralności warunkowanej ułożeniem podstawników.

Pochodne achiralnych macierzystych fullerenów, w których chiralny układ podstawników w fullerenie jest jedynie wynikiem nieidentyczności podstawników mają nieinherentnie chiralne ułożenie podstawników.

Do ustalenia rankingu podstawników stosuje się system CIP, reguły sekwencji **1** lub **2** (patrz P-91.1.1). W podanych niżej enancjomerycznych dwupodstawionych fullerenach, grupa *tert*-butylowa ma pierwszeństwo przed grupą 3,6-dicyklopropylocyklohepta-2,4,6-trien-1-ylową. Do opisu konfiguracji absolutnej używa się tu stereodeskryptorów '$^{f,x}C$' i '$^{f,x}A$' (zgodnie ze wskazówkami podanymi w P-93.5.6.2) w zależności od tego, czy droga od 'C-1' poprzez 'C-2' do 'C-3' jest zgodna, czy niezgodna z ruchem wskazówek zegara.

Przykład:



(f,s*C*)- (f,s*A*)-

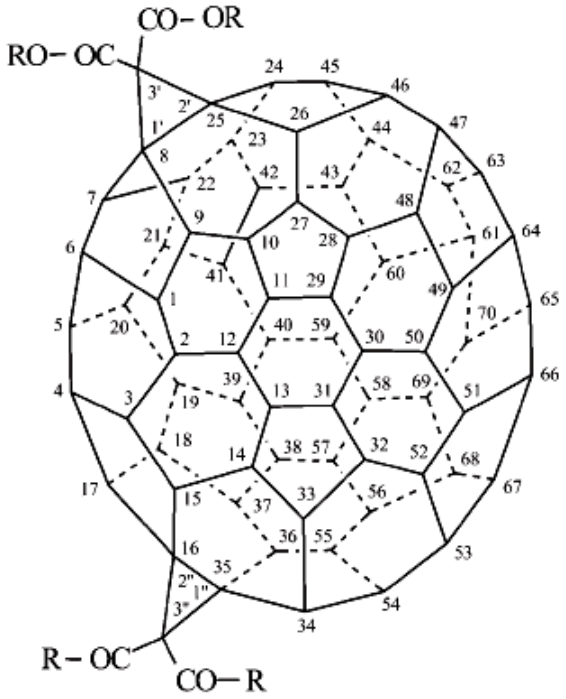
1-*tert*-butylo-7-(3,6-dicyklopropylocyklohepta-2,4,6-trien-1-ylo)-1,7-dihydro-(C_{60}-I_h)[5,6]fulleren (PIN)

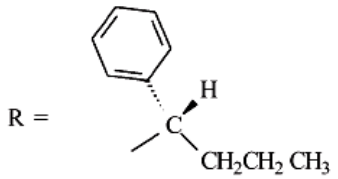
Wyjaśnienie: Ten związek jest chiralny tylko dlatego, że podstawniki są konstytucyjnie różne. Macierzysty fulleren jest achiralny i nie ma inherentnie chiralnego ułożenia podstawników z uwagi na to, że zamiana obu podstawników względem tego samego podstawnika próbnego (testowego) 'T' daje wynik taki, jak dla związku achiralnego. Z tego względu ma on nieinherentną chiralność warunkowaną ułożeniem podstawników. Grupie tert-butylowej przypisuje się lokant '1' z uwagi na jej większe pierwszeństwo CIP w stosunku do grupy 3,6-dicyklopropylocyklohepta-2,4,6-trien-1-ylowej.

P-93.5.6.5 Typ 4. Chiralność spowodowana chiralnością podstawników.

Pochodne achiralnych, macierzystych fullerenów, w których obecność chiralnych podstawników nie kreuje chiralnego układu podstawników, mają jednostki stereogeniczne ulokowane wyłącznie w podstawnikach. W pochodnych tego typu, chiralność lokowaną w podstawnikach wyraża się przy użyciu zwykłych stereodeskryptorów CIP. W podanym niżej przykładzie, konfiguracja '*S*' grupy organylowej obecnej w podstawniku –CO-O-R jest jedynym stereodeskryptorem potrzebnym do opisu konfiguracji rozpatrywanego związku.

Przykład:





Konfiguracja = *S*

3′*H*,3′′*H*-dicyklopropa[8,25:16,35](C_{70}-$D_{5h(6)}$)[5,6]fullereno-3′,3′,3′′,3′′-tetrakarboksylan tetrakis[(1*S*)-1-fenylobutylu]

Wyjaśnienia:

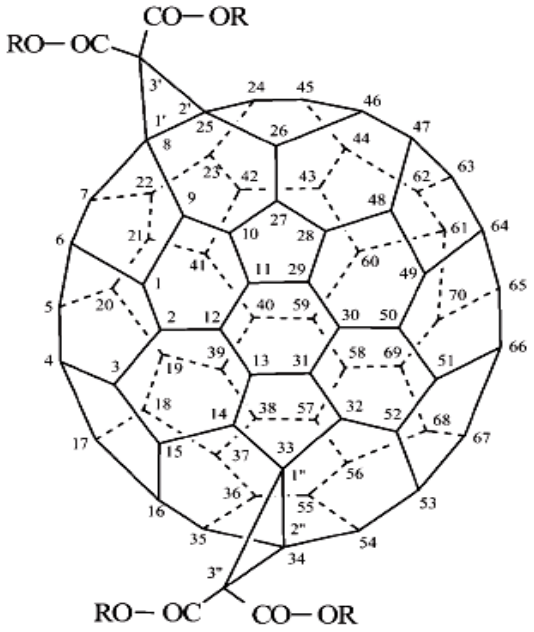
(a) Ta pochodna fullerenu jest chiralna. Macierzysty fulleren jest achiralny i pochodna ma achiralne ułożenie podstawników. Konfiguracja podstawników może być opisana przy użyciu zwykłych deskryptorów nomenklatury organicznej (patrz rozdział P-91.3).

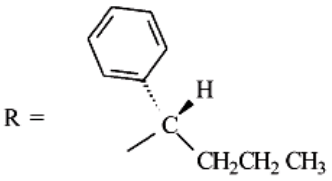
(b) Gdyby estry kwasów w powyższym przykładzie były różne, macierzysty fulleren i ułożenie podstawników ciągle pozostawałyby achiralne i dlatego chiralność całego związku zależałaby od centrów stereogenicznych zlokalizowanych w podstawnikach.

P-93.5.6.6 Nakładanie elementów stereogenicznych w cząsteczce fullerenu

Gdy pochodna fullerenu o inherentnym lub nieinherentnym chiralnym ułożeniu podstawników ma podstawniki chiralne, istnieje konieczność wskazania konfiguracji obu typów elementów stereogenicznych. Te dwa typy są od siebie niezależne i określenie konfiguracji obydwu jest niezbędne przy pełnym opisie związku.

Przykład:





Konfiguracja = *S*

Konfiguracja = (^{f,s}*C*)-

(^{f,s}*C*)-3′*H*,3′′*H*-dicyklopropa[8,25:33,34](C_{70}-$D_{5h(6)}$)[5,6]fullereno-3′,3′,3′′,3′′-tetrakarboksylan tetrakis[(1*S*)-1-fenylobutylu]

Wyjaśnienie: Chiralności centrów stereogenicznych w estrach są nałożone na deskryptor opisujący fulleren z inherentnie chiralnym ułożeniem podstawników. Enancjomer tego związku miałby nazwę:

(^{f,s}*A*)-3′*H*,3′′*H*-dicyklopropa[8,25:33,34](C_{70}-$D_{5h(6)}$)[5,6]fullereno-3′,3′,3′′,3′′-tetrakarkoksylan tetrakis[(1*R*)-1-fenylobutylu]

i podobnie dla rozmaitych diastereoizomerów.

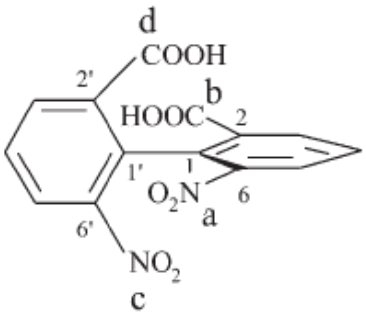
P-93.5.7 Zespoły pierścieni

P-93.5.7.1 Opis osi stereogenicznych
P-93.5.7.2 Opis centrów stereogenicznych
P-93.5.7.3 Opis podwójnych wiązań w nienasyconych pierścieniach i w układach pierścieni

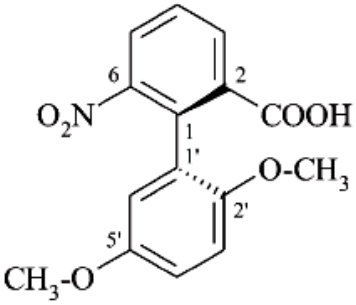
P-93.5.7.1 Opis osi stereogenicznych

Zgodnie z metodologią opisaną w P-92.1.2.2.1 i P-92.1.2.1.2 do oznaczenia stereogenicznej osi deskryptory ‘*P*’ i ‘*M*’ są preferowane w stosunku do ‘R_a’ i ‘S_a’.

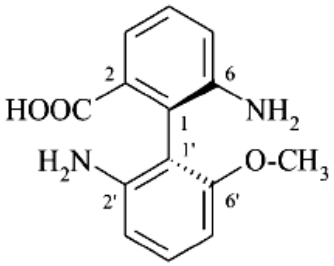
Przykłady:



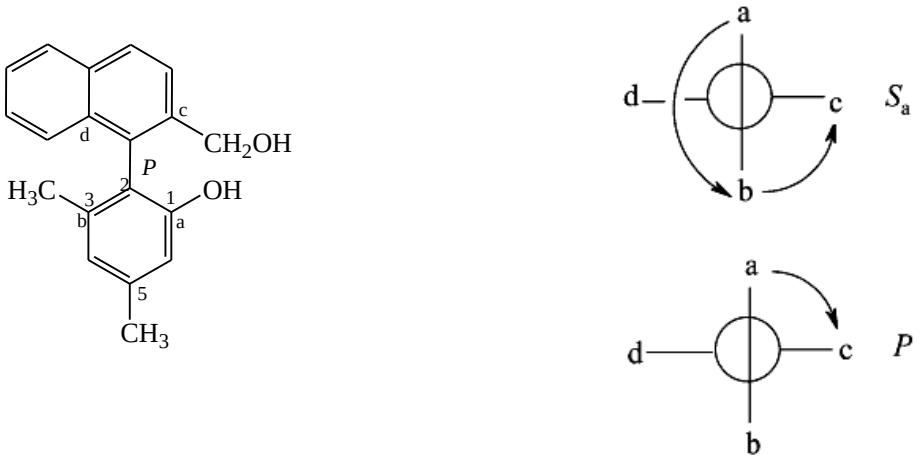
kwas (1*M*)-6,6′-dinitro-[1,1′-bifenylo]-2,2′-dikarboksylowy (PIN)
kwas (1R_a)-6,6′-dinitro[1,1′-bifenylo]-2,2′-dikarboksylowy



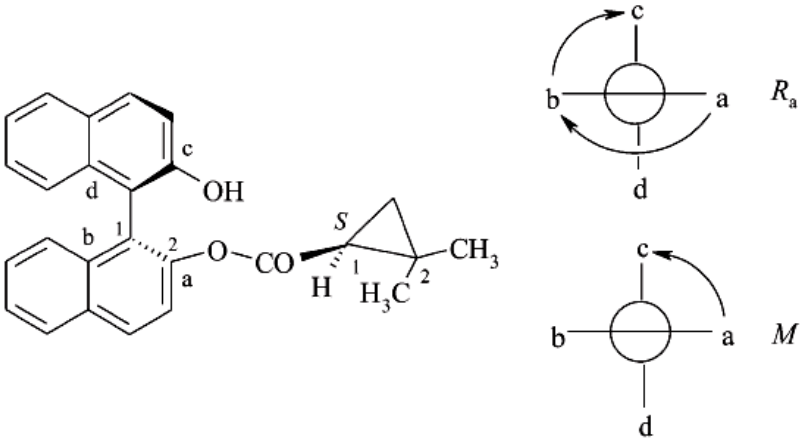
kwas (1*P*)-2′,5′-dimetoksy-6-nitro[1,1′-bifenylo]-2-karboksylowy (PIN)
kwas (1S_a)-2′,5′-dimetoksy-6-nitro[1,1′-bifenylo]-2-karboksylowy



kwas (1*M*)-2′,6-diamino-6′-metoksy[1,1′-bifenylo]-2-karboksylowy (PIN)
kwas (1R_a)- 2′,6-diamino-6′-metoksy[1,1′-bifenylo]-2-karboksylowy



(2*P*)-2-[2-(hydroksymetylo)naftalen-1-ylo]-3,5-dimetylofenol (PIN)
(2S_a)-2-[2-(hydroksymetylo)naftalen-1-ylo]-3,5-dimetylofenol

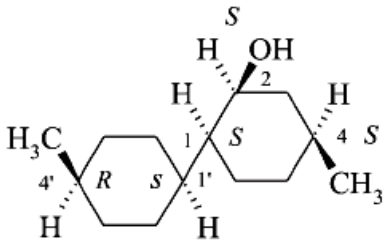


(1*S*)-2,2-dimetylocyklopropano-1-karboksylan (1*M*)-2′-hydroksy[1,1′-binaftalen]-2-ylu (PIN)
(1*S*)-2,2-dimetylocyklopropano-1-karboksylan (1R_a)-2′-hydroksy[1,1′-binaftalen]-2-ylu

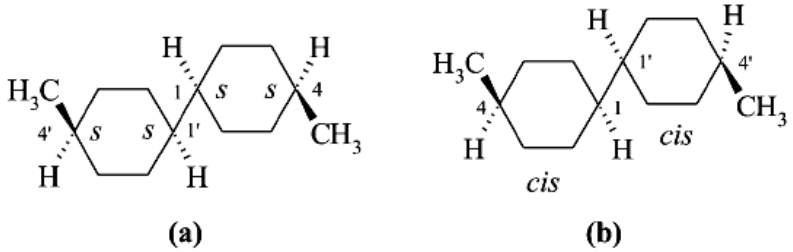
P-93.5.7.2 Opis centrów stereogenicznych

W preferowanych nazwach IUPAC, centra stereogeniczne opisuje się przy użyciu stereodeskryptorów takich jak '*R*', '*S*', '*r*' i '*s*'. W nomenklaturze ogólnej można używać stereodeskryptorów '*cis*' i '*trans*', jak opisano w P-93.5.2.2.2.

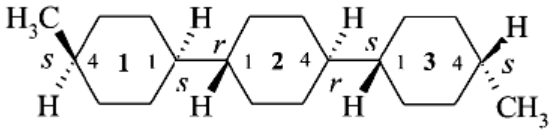
Przykłady:



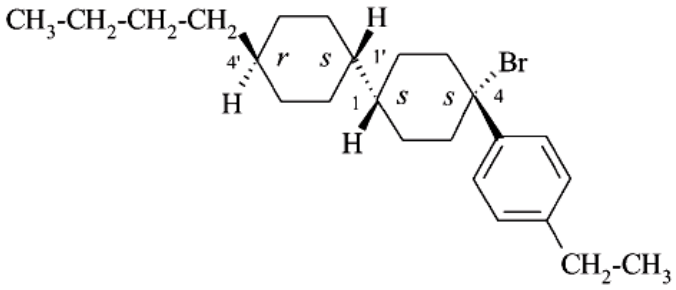
(1*S*,1′*s*,2*S*,4*S*,4′*R*)-4,4′-dimetylo[1,1′-bi(cykloheksan)]-2-ol (PIN)



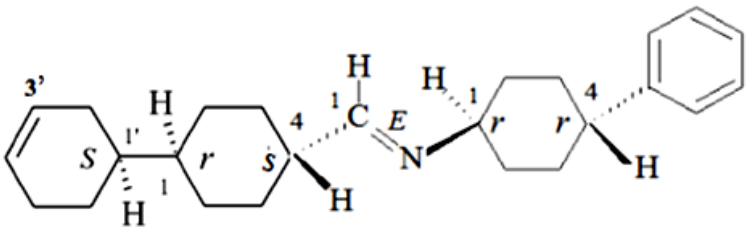
(a) (1*s*,1′*s*,4*s*,4′*s*)-4,4′-dimetylo-1,1′-bi(cykloheksan) (PIN)
(b) [1(4)-*cis*,1′ (4′)-*cis*]-4,4′-dimetylo-1,1′-bi(cykloheksan)



(1^1s,1^4s,2^1r,2^4r,3^1s,3^4s)-1^4,3^4-dimetylo-1^1,2^1:2^4,3^1-tercykloheksan (PIN)
[1^1(1^4)-*cis*,2^1(2^4)-*trans*,3^1(3^4)-*cis*]-1^4,3^4-dimetylo-1^1,2^1:2^4,3^1-tercykloheksan



(1*s*,1′*s*,4*s*,4′*r*)-4-bromo-4′-butylo-4-(4-etylofenylo)-1,1′-bi(cykloheksan)
(1^1s,1^4r,2^1s,2^4s)-2^4-bromo-1^4-butylo-3^4-etylo-1^1,1^2,1^3,1^4, 1^5,1^6, 2^1,2^2,2^3,2^4, 2^5,2^6-dodekahydro-1^1,2^1:2^4,3^1-terfenyl (PIN)
(1*s*,1′*s*,4*r*,4′*s*)-4′-bromo-4-butylo-4″-etylo-1,1′,2,2′,3,3′4,4′,5,5′,6,6′- dodekahydro-1^1,1′:4′,1″-terfenyl



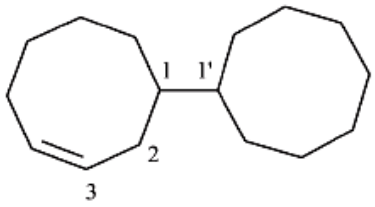
(1*E*)-1-{(1′*S*,1*r*,4*s*)-[1,1′-bi(cykloheksan)]-3′-en-4-ylo}-*N*-[(1*r*,4*r*)-4-fenylocykloheksylo]metano-1-imina (PIN)
(1*E*)-1-[1′*S*,1(4)*trans*]-1,1′-bi(cykloheksan)-3′-en-4-ylo]-*N*-[(1*r*,4*r*)-4-fenylocykloheksylo]metanoimina

,

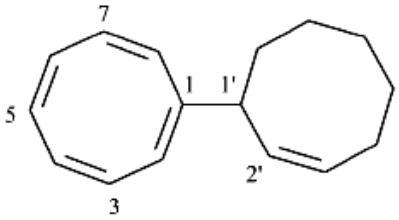
P-93.5.7.3 Opis podwójnych wiązań w nienasyconych pierścieniach i w układach pierścieni

Ogólną metodologię opisaną w P-91.2.2 stosuje się do zespołów nienasyconych pierścieni alicyklicznych. W pierścieniach ośmioczłonowych wszystkie jednostki stereogeniczne muszą być określone, gdy określeniu wymaga jedna z nich.

Przykłady:



(3*Z*)-[1,1′-bi(cyklooktan)]-3-en (PIN)

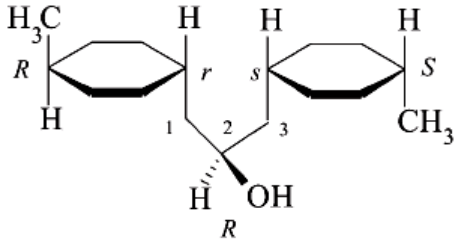


(1*Z*,2′*Z*,3*Z*,5*Z*,7*Z*)-[1,1′-bi(cyklooktano)]-1,2′,3,5,7-pentaen (PIN)

P-93.6 ZWIĄZKI SKŁADAJĄCE SIĘ Z ŁAŃCUCHÓW I PIERŚCIENI

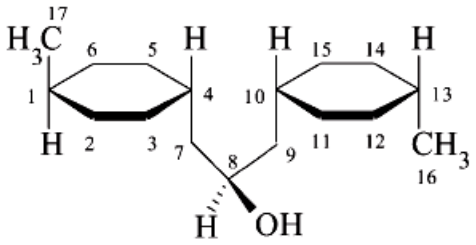
W procesie konstruowania nazwy związków organicznych pierwszy etap polega na tworzeniu nazwy według zasad, reguł i konwencji opisanych w rozdziałach od P-1 do P-8; w drugim etapie dodaje się stereodeskryptory zgodnie z regułami podanymi w rozdziale P-9. Dodanie stereodeskryptorów nie zmienia preferowanej nazwy IUPAC będącej nazwą nomenklatury podstawnikowej, nazwą fanu lub nazwą klasowo-funkcyjną czy nazwą nomenklatury zamiennej (‘a’) szkieletu, z uwagi na to, że stereodeskryptory dodawane są zgodnie z numeracją. Uwagi wymaga operowanie nazwą nomenklatury multiplikatywnej, która musi być tworzona zgodnie z wymogami symetrii (ze stereodeskryptorami włącznie), niezbędnymi w tym typie nomenklatury, aby nazwa ta mogła być akceptowana jako preferowana nazwa IUPAC.

Przykład 1:

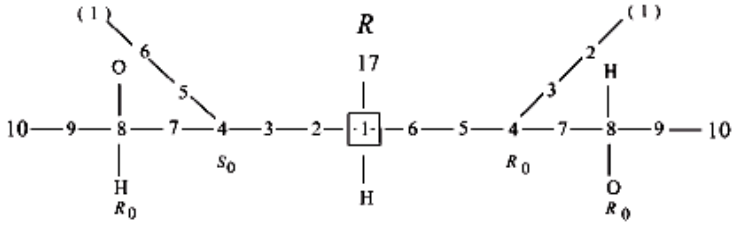


(2*R*)-1-[(1*r*,4*R*)-4-metylocykloheksylo]-3-[(1*s*,4*S*)-4-metylocykloheksylo]propan-2-ol (PIN)

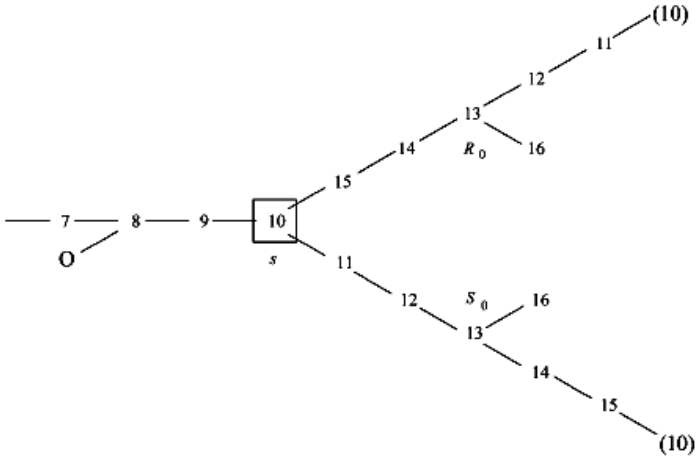
Wyjaśnienie:



numeracja umowna do uproszczonego digrafu



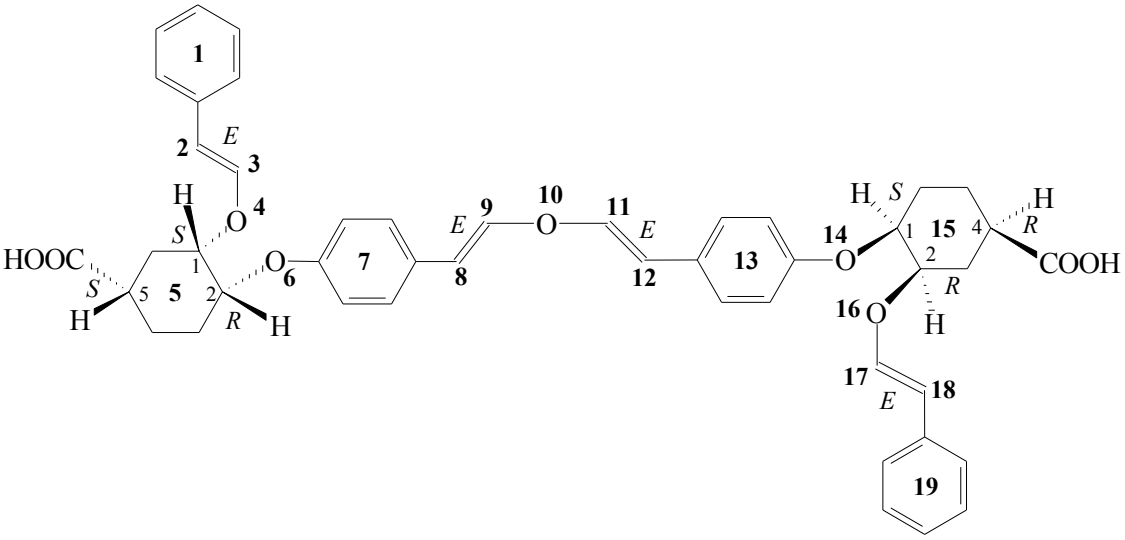
uproszczony digraf uzasadniający konfigurację ‘*R*’ dla centrum ‘C-1’



częściowo uproszczony digraf uzasadniający konfigurację ‘*s*’ dla centrum ‘C-10’

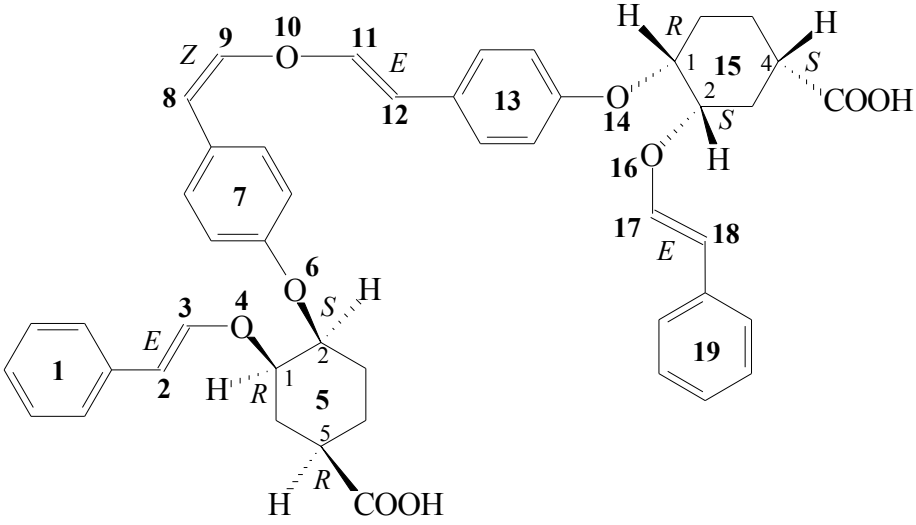
Konfigurację ‘*R*’ centrum ‘C-8’ ustala się w oparciu o regułę sekwencji **4c** (‘*r*’ poprzedza ‘*s*’).

Przykład 2:



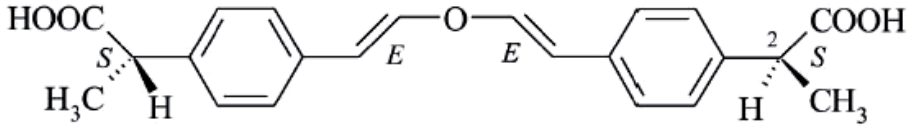
kwas (2*E*,5^1*S*,5^2*R*,5^5*S*,8*E*,11*E*,15^1*S*,15^2*R*,15^4*R*,17*E*)-4,6,10,14,16- pentaoksa-1,19(1),7,13(1,4)-tetrabenzena-5,15(1,2)-dicykloheksananonadekafano-2,8,11,17-tetraeno-5^5,15^4-dikarboksylowy (PIN; nazwa fanu)

Przykład 3:



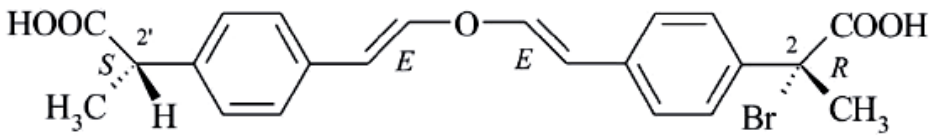
kwas (2*E*,5^1*R*,5^2*S*,5^5*R*,8*Z*,11*E*,15^1*R*,15^2*S*,15^4*S*,17*E*)-4,6,10,14,16-pentaoksa-1,19(1),7,13(1,4)-tetrabenzena-5,15(1,2)-dicykloheksananonadekafano-2,8,11,17-tetraeno-5^5,15^4-dikarboksylowy (PIN; nazwa fanu)

Przykład 4:



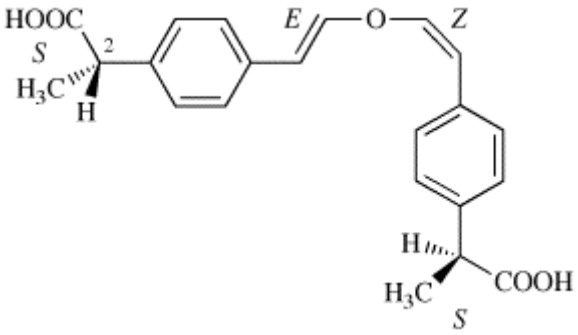
kwas (2*S*,2'*S*)-2,2'-{oksybis[(1*E*)-eten-2,1-diylo-4,1-fenyleno]}dipropionowy (PIN)
(nazwa multiplikatywna jest preferowaną nazwą IUPAC, wymogi symetrii dla możliwości jej zastosowania są spełnione)

Przykład 5:



kwas (2*R*)-2-bromo-2-{4-[(1*E*)-2-{[(1*E*)-2-{4-[(1*S*)-1-karboksyetylo]fenylo}eten-1-ylo]oksy}eten-1-ylo]fenylo}propanowy (PIN; nazwa multiplikatywna nie jest dozwolona ze względu na różne stereodeskryptory oraz nieidentyczne powtórzone zespoły macierzyste)

Przykład 6:



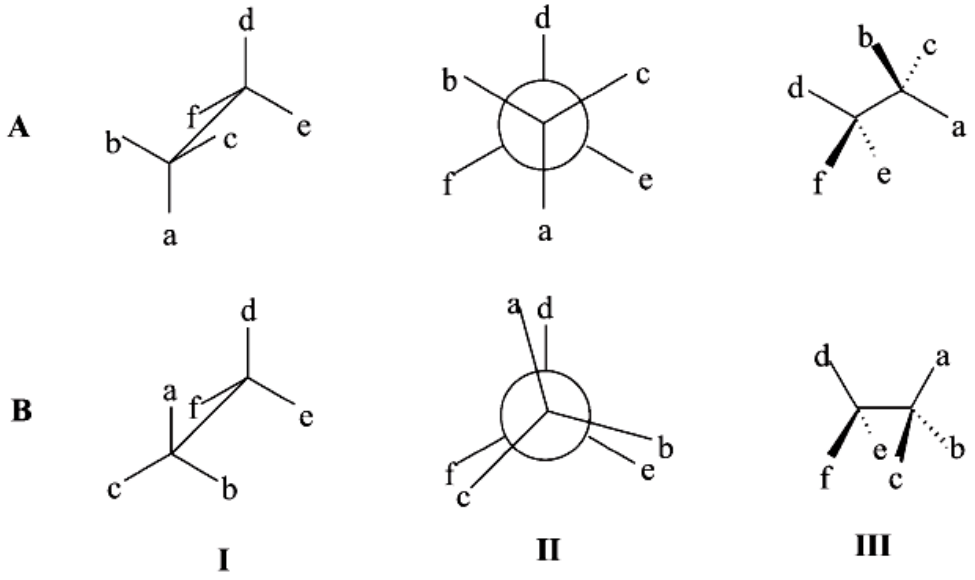
kwas (2*S*)-2-{4-[(1*E*)-2-{[(1*Z*)-2-{4-[(1*S*)-1- karboksyetylo]fenylo}eten-1-ylo]oksy}eten -1-ylo]fenylo}propanowy (PIN; nazwa multiplikatywna nie jest dozwolona ze względu na brak identycznych fragmentów przy grupie centralnej)

P-94 KONFORMACJA I DESKRYPTORY KONFORMACYJNE

Rozdział ten opiera się na publikacji IUPAC '*Terminology of Stereochemistry'* (odn. 37).

P-94.1 DEFINICJA

Konformacjami nazywa się różne ułożenia przestrzenne atomów prowadzące do różnic pomiędzy stereoizomerami, które można wzajemnie przeprowadzać w siebie poprzez rotację dokoła formalnie pojedynczych wiązań, jak to pokazano dla konformerów A i B na rys. 9.3.



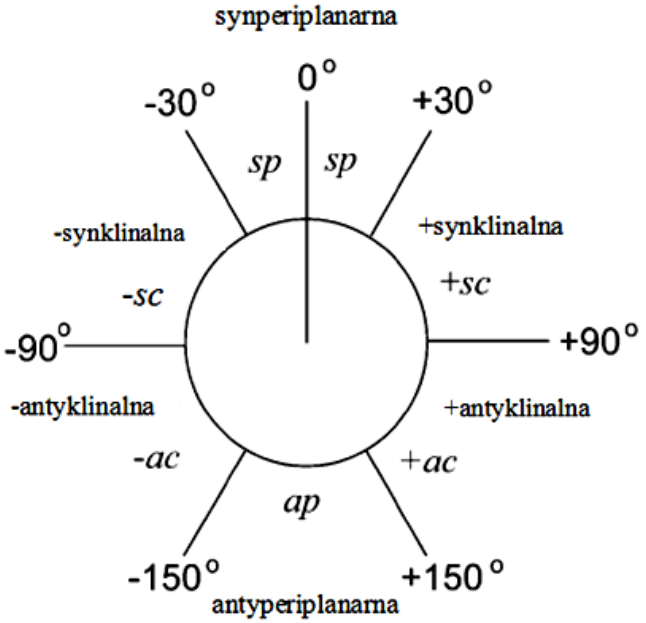
I wzory konikowe **II** projekcja Newmana **III** projekcja zygzakowata

Rys. 9.3. Trzy różne sposoby przedstawiania dwóch konformerów A i B

P-94.2 KĄTY TORSYJNE

P-94.2.1 W ułożeniu połączonych atomów X-A-B-Y, gdzie ani X ani Y nie są współliniowe z A i B, mniejszy kąt tworzony w rzucie planarnym przez wiązania X-A i Y-B, widoczny przy oglądzie ułożenia w kierunku osi A-B określany jest jako 'kat torsyjny' i oznaczany pisaną kursywą małą grecką literą θ. Rozpatruje się dodatni i ujemny kąt torsyjny w zależności od tego, czy atom X lub Y wymagają obrotu w prawo (zgodnie z ruchem wskazówek zegara) czy w lewo (przeciwnie do ruchu wskazówek zegara) aby wiązanie widziane z przodu pokryło się z widzianym z tyłu wiązaniem z wybranym atomem X lub Y. Krotność wiązania z ruchomymi atomami nie ma tu znaczenia. Kąt torsyjny istnieje także wtedy, gdy oś rotacji obejmuje więcej niż dwa współliniowe atomy, powiązane parami między sobą.

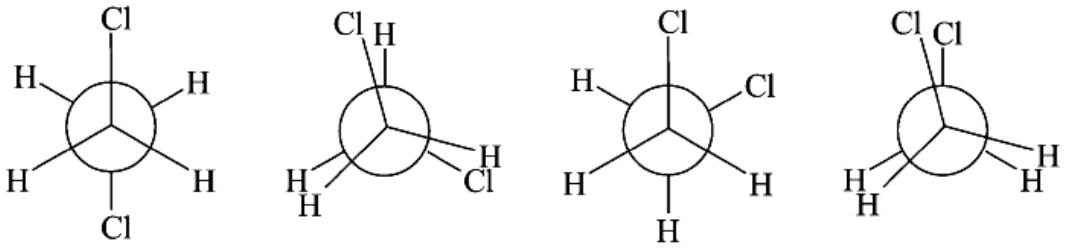
Konformacje określa się jako: synperiplanarną (*sp*), synklinalną (*sc*), antyklinalną (*ac*) lub antyperiplanarną (*ap*), gdy wartości kąta torsyjnego wynoszą z dokładnością $\pm 30^0$ odpowiednio: 0°, $\pm 60^o$, $\pm 120^o$ lub $\pm 180^o$; litery podane w nawiasach stanowią skróty powyższych nazw.



Aby wybrać odpowiedni stereodeskryptor, atomy lub grupy wybiera się z każdego zbioru definiującego kąt torsyjny według następujących kryteriów:

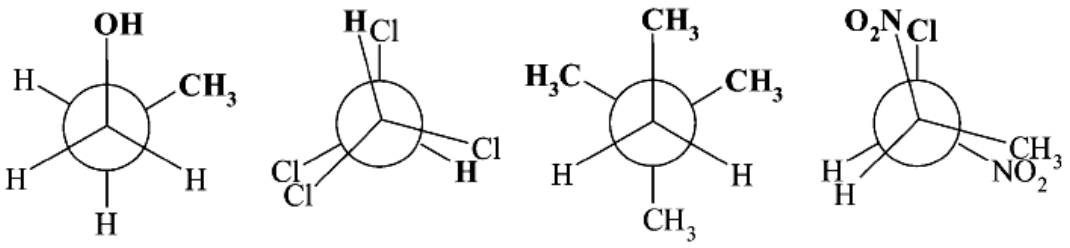
(a) jeżeli wszystkie atomy lub grupy rozpatrywanego zbioru są różne, wybiera się ten, który ma pierwszeństwo według reguł sekwencji;
(b) jeżeli jeden atom ze zbioru jest inny niż pozostałe wybiera się ten odmienny atom
(c) jeżeli wszystkie zbiory są identyczne, wybiera się ten, któremu odpowiada najmniejszy kąt torsyjny

Przykłady:



antyperiplanarna antyklinalna synklinalna synperiplanarna

(o konformacji decydują dwa atomy chloru)



synklinalna antyklinalna synklinalna synperiplanarna

Zastosowano kryterium (spośród podanych wyżej):

dla atomu dalszego

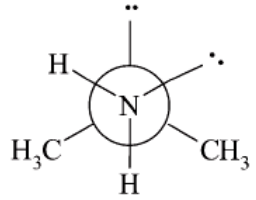
2 2 3 1

dla atomu bliższego

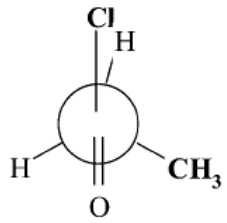
2 2 2 1

P-94.2.2 Przy opisie konformacji dla przypadku, gdy ‘A’ i ‘B’ w układzie ‘X-A-B-Y’ są centrami trygonalnymi bierze się pod uwagę wolną parę elektronów zapisaną przy użyciu dwóch kropek, jak to ilustruje poniższy przykład opisujący konformację 1,1-dimetylohydrazyny, $(CH_3)_2N\text{-}NH_2$; wolne pary elektronów stanowią atomy fantomalne w znaczeniu podanym w regułach sekwencji. Podobnie, przy określaniu porządku pierwszeństwa w przypadku centrów trygonalnych z wiązaniami podwójnymi, analizę przeprowadza się stosując reguły sekwencji i atomy powtórzone.

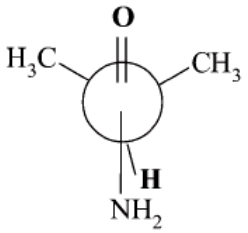
Przykłady:



$(CH_3)_2N\text{-}NH_2$



$CH_3\text{-}CH_2\text{-}CO\text{-}Cl$



$(CH_3)_2CH\text{-}CO\text{-}NH_2$

synklinalna antyklinalna antyperiplanarna

Zastosowano kryterium (spośród podanych wyżej):

dla atomu dalszego

2 2 2

dla atomu bliższego

2 1 1

P-94.3 SZCZEGÓLNE STEREODESKRYPTORY

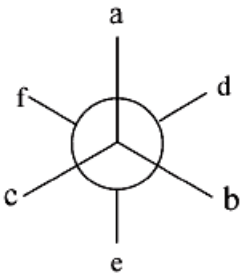
Stereodeskryptory używane są do oznaczania specyficznych konformerów zarówno alifatycznych jak i alicyklicznych.

P-94.3.1 Konformacje naprzemianległe, naprzeciwległe i ‘gauche’ (lub ‘skośne’)

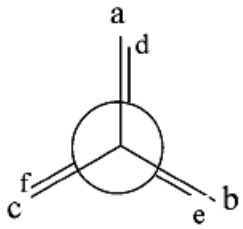
P-94.3.1.1 Mówi się, że dwa atomy lub grupy dołączone do dwóch sąsiednich atomów znajdują się w ułożeniu naprzeciwległym, gdy kat torsyjny między nimi wynosi zero. Mówi się, że są one w ułożeniu naprzemianległym, gdy ułożenie to odbiega najbardziej jak to możliwie od konformacji naprzeciwległej. Terminy ‘gauche’ lub ‘skośna’ są synonimami terminu ‘synklinalna’, który jest

terminem preferowanym. Nie zaleca się stosowania stereodeskryptorów ‘*trans*’ lub ‘*anti*’ na miejsce ‘antyklinalna’ ani też ‘cis’ lub ‘syn’ na miejsce ‘synklinalna’. Stereodeskryptorów ‘naprzemianległa’ i ‘naprzeciwległa’ używa się do opisu konformacji w sytuacji, gdy wszystkie ligandy są identyczne.

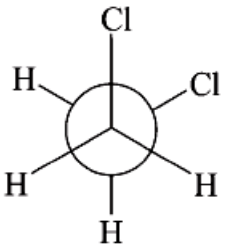
Przykłady:



konformacja naprzeciwległa (wszystkie dołączone grupy są poprzesuwane)

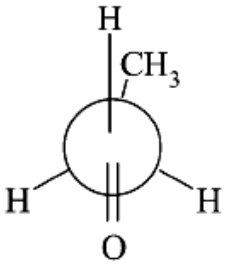


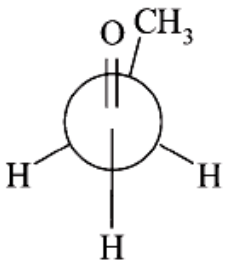
konformacja naprzemianległa (pary a-d, b-e i c-f zasłaniają się)



synklinalna (zalecana) gauche lub skośna

P-94.3.1.2 Dla struktury zawierającej ugrupowanie $R_3C\text{-}C(Y)=X$ (z identycznymi lub różnymi grupami R) konformacja, w której kąt torsyjny jest taki, że X jest w położeniu antyperiplanarnym względem jednej z grup R, a w projekcji Newmana podwójne wiązanie przepoławia kąt R-C-R nazywa się ‘konformacją dwusieczną’. Druga konformacja, w której X jest w położeniu synperiplanarnym do jednej z grup R nazywa się ‘konformacją zasłoniętą’.





wzory rzutowe dla $CH_3\text{-}CH_2\text{-}CHO$

konformacja połowiąca (dwusieczna)

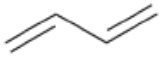
konformacja zasłonięta

P-94.3.1.3 Stereodeskryptory s-*cis* i s-*trans*

Przestrzenne uporządkowanie dwu sprzężonych podwójnych wiązań względem rozdzielającego je pojedynczego wiązania opisuje się jako ‘s-*cis*’ (jeżeli jest to ułożenie synperiplanarne) i ‘s-*trans*’ w przypadku ułożenia antyperiplanarnego. Deskryptora tego nie można stosować do innych układów, takich jak *N*-alkiloamidy (należy użyć deskryptorów ‘*E*/*Z*’ lub ‘*sp*/*ap*’).

Przykłady:

s-*cis*



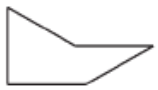
s-*trans*

P-94.3.2 Stereodeskryptory do opisu konformacji pierścieni alicyklicznych

P-94.3.2.1 Konformacja kopertowa

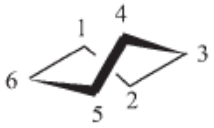
Konformacja kopertowa jest to konformacja pierścienia pięcioczłonowego, w której cztery atomy leżą w jednej płaszczyźnie, natomiast piąty z nich ulokowany jest poza tą płaszczyzną.

Przykład:



P-94.3.2.2 Konformacje: krzesłowa, łodziowa i skręcona

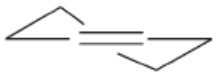
Gdy atomy węgla 1, 2, 4 i 5 pierścienia sześcioczłonowego przyjmują położenia współpłaszczyznowe , a atomy 3 i 6 znajdują się po przeciwnych stronach tej płaszczyzny, wówczas konformację tę określa się jako konformację krzesłową. Gdy atomy 3 i 6 znajdują się po tej samej stronie wymienionej wyżej płaszczyzny, konformacja taka nazywa się konformacją łodziową. Konformacja, przejściowa w procesie wzajemnego przekształcania obu form łodziowych pierścienia sześcioczłonowego nazywa się konformacją skręconą; ten termin jest preferowany w stosunku do terminów: skręcona łódka lub forma rozciągnięta



W stereochemii węglowodanów termin ‘skręcony’ odnosi się do pierścienia pięcioczłonowego a termin konformacja skręcona odpowiada skręconej łódce.

P-94.3.2.3 Półkrzesło

Mówi się, że cząsteczka pierścienia sześcioczłonowego z jednym wiązaniem podwójnym przyjmuje konformację półkrzesłową, gdy atomy nie związane bezpośrednio z tym wiązaniem leżą po przeciwnych stronach płaszczyzny wyznaczonej przez podwójne wiązanie i sąsiadujące z nim wiązania pojedyncze.



P-94.3.2.4 Konformacja koronowa

Konformacja nasyconego cyklicznego indywiduum molekularnego zawierającego parzystą liczbę (≥ 8) atomów w pierścieniu, w której atomy te leżą naprzemiennie w dwu równoległych płaszczyznach i są symetrycznie równoważne (D_{4d} dla cyklooktanu, D_{5d} dla cyklodekanu itd.), nazywa się ‘konformacją koronową’.

cyklooktan

cyklodekan

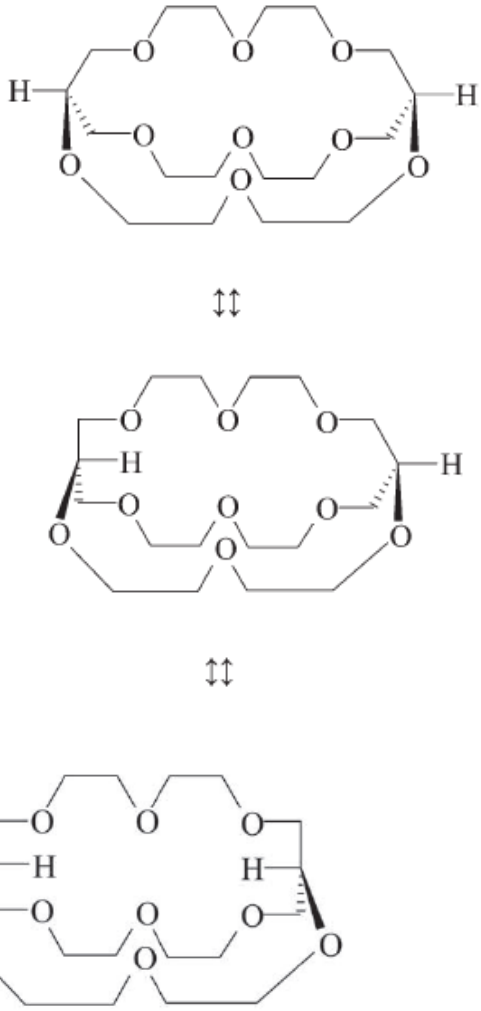
P-94.3.2.5 Konformacja wannowa

Konformacja pierścienia ośmioczłonowego, w której cztery atomy tworzące parę wiązań i ulokowane na końcach dwu głównych przekątnych pierścienia, leżą w jednej płaszczyźnie a wszystkie inne atomy pierścienia leżą po tej samej stronie tej płaszczyzny, nazywa się ‘konformacją wannową’

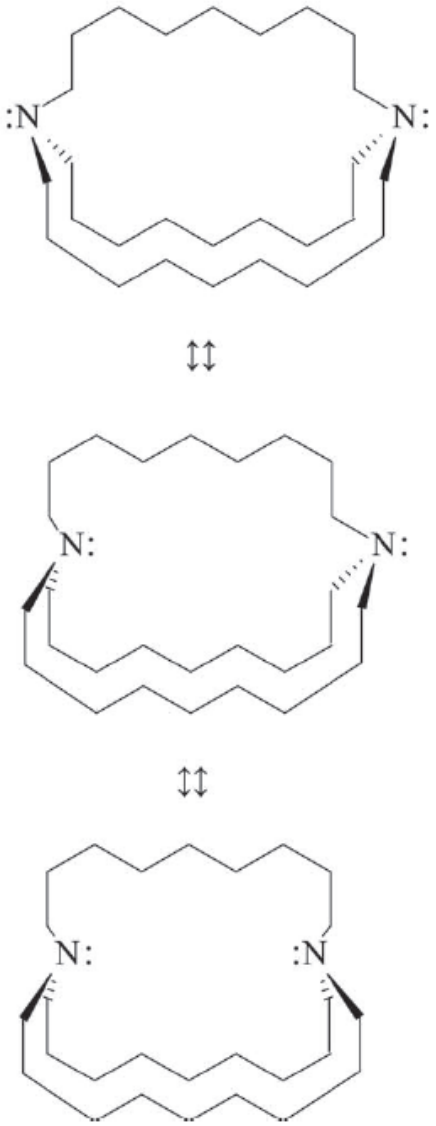
P-94.3.2.6 Izomeria dośrodkowo-odśrodkowa (‘in-out’)

Izomeria dośrodkowo-odśrodkowa występuje w układach bicyklicznych mających wystarczająco długie mostki, aby przyczółkowe wiązanie egzocykliczne albo wolna para elektronów mogły być skierowane bądź na zewnątrz bądź do wewnątrz.

Przykład 1:



Przykład 2:


:N
N:
↕↕
N:
N:
↕↕
N:
:N

ROZDZIAŁ P-10 MACIERZYSTE STRUKTURY PRODUKTÓW NATURALNYCH I POKREWNYCH ZWIĄZKÓW

P-100 Wprowadzenie
P-101 Nomenklatura naturalnych produktów oparta na macierzystych wodorkach (alkaloidy, steroidy, terpeny, karoteny, korynoidy, tetrapirole, i podobne związki)
P-102 Nomenklatura węglowodanów
P-103 Aminokwasy i peptydy
P-104 Cyklitole
P-105 Nukleozydy
P-106 Nukleotydy
P-107 Lipidy

P-100 WPROWADZENIE

Na polu produktów naturalnych wyróżnia się trzy poziomy. Nowemu związkowi, wyizolowanemu z naturalnego źródła, zazwyczaj nadaje się nazwę zwyczajową. Te nazwy zwyczajowe najczęściej odnoszą się do biologicznego pochodzenia substancji, chociaż często nie w sposób racjonalny ponieważ jeszcze niewiele wiadomo o wyodrębnionej strukturze. Takie nazwy traktuje się jako przejściowe, które w przyszłości będą zastąpione nazwami opisującymi szkielet, grupy charakterystyczne i podstawniki.

Kiedy będzie już znana pełna struktura, można będzie utworzyć nazwę systematyczną zgodnie z regułami opisanymi w rozdziałach P-1 do P-9 tych zaleceń. Jednak taka nazwa może być zbyt niewygodna do częstego wstawiania do tekstu publikacji. Trudność tę można pokonać wykazując ścisłe podobieństwo do pokrewnych związków i tworząc nazwę 'semi-systematyczną'. W tym rozdziale nie tworzy się nazw preferowanych przez IUPAC (PIN). Wybór pomiędzy nazwami semi-systematyczną i systematyczną będzie efektem współdziałania IUPACu i IUMB Joint Commission on Biochemical Nomenclature i zostanie podany w przyszłych publikacjach.

Nazwy semi-systematyczne opierają się na określonych strukturach macierzystych o określonej konfiguracji, co może w przyszłości pomóc w pełnym opisaniu struktury z użyciem reguł nomenklatury systematycznej. Istnieją dwa ogólne rodzaje semi-systematycznych struktur macierzystych używanych do tworzenia nazw produktów naturalnych i związków pokrewnych.

(a) macierzyste wodorki, to jest struktury nie posiadające terminalnych heteroatomów ani grup funkcyjnych, czyli składające się tylko z atomów szkieletu i atomów wodoru, na przykład w nomenklaturze steroidów (odn. 16), terpenów, karotenów (odn. 40), korynoidów (odn. 45), tetrapiroli (odn. 17) lignanów i neolignanów (odn. 46) i alkaloidów. Ten typ semisystematycznych macierzystych wodorków jest analogiczny do związków macierzystych opisanych w P-2 i traktuje się je tak samo przy tworzeniu pełnych nazw;

(b) związki o macierzystych funkcjach będące analogami związków o macierzystych funkcjach opisanych w P-34, czyli nomenklatur aminokwasów i peptydów (odn. 27), węglowodanów (odn. 26), cyklitoli (odn. 39), nukleozydów i nukleotydów (odn. 47) i lipidów (odn. 8); mają grupy charakterystyczne zawarte w nazwach, które można modyfikować specyficznymi regułami używanymi w nomenklaturze systematycznej.

Podrozdział P-101 podaje reguły tworzenia nazw zwyczajowych i semi-systematycznych wodorków macierzystych oraz ich transformacji szkieletowych i funkcjonalizacji prowadzących do nazywania alkaloidów, steroidów, terpenów i niektórych pochodnych. Podrozdział P-102 podaje

reguły nazywania węglowodanów, w P-103 opisano nomenklaturę aminokwasów i peptydów, w P-104 nomenklaturę cylitoli, P-105 i P-106 opisują nukleozydy i nukleotydy a P-107 dyskutuje nomenklaturę lipidów. W razie napotkania trudności należy odwołać sie do pełnych publikacji, jak opisano w każdym z podrozdziałów.

P-101 NOMENKLATURA PRODUKTÓW NATURALNYCH OPARTA NA MACIERZYSTYCH WODORKACH (ALKALOIDY, STEROIDY, TERPENY, KAROTENY, KORYNOIDY, TETRAPIROLE I PODOBNE ZWIĄZKI)

Rozdział ten opiera się na niedawnej publikacji 'Revised Section F: Natural Products and Related Compounds, IUPAC Recomendations 1999' i dodatkowym dokumencie 'Corrections and Modifications 2004' (lit. 9).

P-101.1 Nazwy zwyczajowe związane z biologicznym pochodzeniem związku
P-101.2 Semi-systematyczna nomenklatura produktów naturalnych (stereomacierzyste wodorki)
P-101.3 Modyfikacje szkieletu struktur macierzystych
P-101.4 Zamiana atomów szkieletu struktur macierzystych
P-101.5 Addycja pierścieni i układów pierścieni
P-101.6 Modyfikacja stopnia uwodornienia struktur macierzystych
P-101.7 Pochodne struktur macierzystych
P-101.8 Dalsze aspekty określania konfiguracji

P-101.1 NAZWY ZWYCZAJOWE ZWIĄZANE Z BIOLOGICZNYM POCHODZENIEM ZWIĄZKU

P-101.1.1 Dla związku wyizolowanego ze źródła naturalnego, dla którego potrzebna jest nazwa zwyczajowa, powinna ona być, jeśli to możliwe, oparta na nazwie rodziny, rodzaju lub gatunku materiału biologicznego, z którego został wyizolowany. Jeżeli związek występuje w wielu pokrewnych rodzinach nazwa klasy lub rzędu może również być podstawą jego nazwy.

P-101.1.2 Stosuje się końcówkę 'un' lub, z powodów brzmieniowych, 'iun', która wskazuje, że nazwa zwyczajowa oznacza związek o nieznanej strukturze.

P-101.2 NOMENKLATURA SEMI-SYSTEMATYCZNA PRODUKTÓW NATURALNYCH (stereomacierzyste wodorki)

P-101.2.0 Wprowadzenie
P-101.2.1 Ogólne reguły wyboru struktur macierzystych
P-101.2.2 Cechy strukturalne, które muszą być uwzględniane przy wyborze struktur macierzystych
P-101.2.3 Numeracja struktur macierzystych
P-101.2.4 Identyfikacja poszczególnych pierścieni
P-101.2.5 Łącznik atomowy, fragment końcowy i łącznik wiązaniowy
P-101.2.6 Stereochemiczna konfiguracja struktur macierzystych
P-101.2.7 Semisystematyczne nazwy rekomendowanych podstawowych struktur macierzystych

P-101.2.0 Wprowadzenie

Wiele występujących w naturze związków należy do dobrze zdefiniowanych klas strukturalnych, z których każdą charakteryzuje zestaw ścisle powiązanych struktur macierzystych, to znaczy że każdą z tych struktur można wyprowadzić z podstawowej struktury macierzystej przy pomocy jednej lub kilku zdefiniowanych operacji stosowanych w systematycznej nomenklaturze podstawnikowej (patrz P-13).

Ustalenie struktury nowego produktu naturalnego powinno skutkować zaprzestaniem stosowania nazwy zwyczajowej na rzecz nazwy systematycznej utworzonej zgodnie z regułami przedstawionymi dla systematycznej nomenklatury związków organicznych w rozdziałach od P-1 do P-9. Aby utworzyć pełną nazwę bardziej złożonych struktur można stosować istniejące nazwy semisystematyczne wymienione w P-101.2.7. Jeżeli dla nowego związku nie można znaleźć struktury macierzystej wśród dotąd określonych, można utworzyć nową strukturę macierzystą łącznie z numeracją. Procedura tworzenia i numerowania nowej struktury macierzystej jest opisana poniżej w kolejnych podrozdziałach.

P-101.2.1 Ogólne reguły wyboru struktury macierzystej

P-101.2.1.1 Podstawowa struktura macierzysta powinna odwzorowywać główny szkielet (zawierający nie końcowe heteroatomy i heterogrupy), wspólny dla większości związków danej klasy.

P-101.2.1.2 Podstawowa struktura macierzysta powinna być wybrana tak, aby struktury możliwie największej liczby produktów naturalnych mogły być z niej wyprowadzone przez dobrze określone operacje i reguły nomenklatury związków organicznych.

P-101.2.1.3 Podstawowa struktura macierzysta powinna zawierać możliwie najwięcej konfiguracji wspólnych dla danej klasy produktów naturalnych. Takie struktury macierzyste nazywa się stereomacierzystymi.

P-101.2.2 Strukturalne cechy uwzględniane przy wyborze struktur macierzystych

Przy tworzeniu nowych struktur macierzystych stosuje się reguły przedstawione poniżej. Istniejące nazwy macierzystych struktur nie spełniające nowych reguł nazywa się nazwami zachowanymi (patrz Tabela 10.1).

P-101.2.2.1 Podstawowa struktura macierzysta może wyjątkowo zawierać pierścienie będące częścią grup charakterystycznych, takie jak na przykład lakton lub cykliczny acetal.

P-101.2.2.2 Podstawowa struktura macierzysta nie powinna zawierać terminalnych heteroatomów ani grup funkcyjnych (patrz P-101.2.1.1).

P-101.2.2.3 Podstawowa struktura macierzysta powinna zawierać acykliczne grupy alkilowe, występujące w większości związków danej klasy produktów naturalnych.

P-101.2.2.4 Podstawowa struktura macierzysta powinna być w pełni uwodorniona lub w pełni nienasycona w sensie posiadania maksymalnej liczby nieskumulowanych wiązań podwójnych (pierścienie mancude), ale nadal reprezentująca stopień nasycenia (lub nienasycenia) możliwie największej liczby pokrewnych związków.

P-101.2.2.5 Semi-systematyczne nazwy podstawowych struktur macierzystych powinny być wyprowadzone, na ile jest to możliwe, z nazw zwyczajowych utworzonych zgodnie z P-101. Końcówki zastosowane w miejsce ‘un’ lub ‘iun’ przypisuje się następująco:

(a) ‘an’, jeżeli stereomacierzysty wodorek jest w pełni nasycony;
(b) ‘en’ jeżeli część cykliczna lub główny łańcuch acyklicznej części zawiera maksymalną liczbę nieskumulowanych wiązań podwójnych;
(c) ‘aran’ w przypadku, kiedy w pełni nasycona struktura zawiera jeden lub więcej pierścieni z maksymalną liczbą nieskumulowanych wiązań podwójnych.

Istniejące nazwy struktur macierzystych, w których końcówki są inne od tych wskazanych powyżej np. morfinan i ibogamina są wyjątkami i należy je traktować jako nazwy zachowane.

P-101.2.2.6 Wskazany atom wodoru, jak opisano w P-14.7, P-52 i P-58.2, stosuje się do opisu izomerów podstawowych struktur macierzystych.

P-101.2.3 Numerowanie struktur macierzystych

P-101.2.3.1 System numerowania ustalony dla grupy strukturalnie pokrewnych produktów naturalnych jest przeniesiony na numerowanie atomów szkieletu podstawowej struktury macierzystej, z zachowaniem zasady, że wszystkie atomy szkieletu są objęte tą numeracją.

P-101.2.3.2 W przypadku braku systemu numerowania dla grupy strukturalnie pokrewnych produktów naturalnych podstawową strukturę macierzystą numeruje się zgodnie z przedstawionymi poniżej zasadami:

(a) ustala się w szkielecie starszy pierścień lub układ pierścieni zgodnie z regułą P-44. Lokant ‘1’ przypisuje się atomowi starszego układu pierścieni, który miałby lokant ‘1’ zgodnie z systemem numerowania przyjętym dla tego konkretnego pierścienia lub układu pierścieni.
(b) wszystkim atomom szkieletu starszego układu pierścieni przypisuje się kolejne cyfry arabskie, włączając atomy pozycji skondensowania w skondensowanym układzie pierścieni, rozpoczynając od lokantu ‘1’ i postępując zgodnie z kolejnością przypisaną temu konkretnemu pierścieniowi lub układowi pierścieni;
(c) acyklicznym podstawnikom związanym z atomami szkieletu pierścienia lub łączącym acykliczne struktury, każdą w całości, zawierającą odgałęzienia, przypisuje się numery w porządku wzrastającej wartości lokantu atomów szkieletu, do których są przyłączone;
(d) atomy szkieletu acyklicznych łączników z innym pierścieniem lub układami pierścieni, jeżeli są, numeruje się kolejno rozpoczynając od atomu bezpośrednio związanego ze starszym pierścieniem i następnie przez atomy szkieletu innych pierścieni lub układów pierścieni jak opisano powyżej w (b); jeżeli występują dwa lub więcej acykliczne łączniki z innymi pierścieniami lub układami pierścieni, ten przyłączony do starszego pierścienia lub układu pierścieni w pozycji o najniższym lokancie numeruje się jako pierwszy, a kolejno pierścień przyłączony do niego, następnie acykliczny łącznik w pozycji o kolejnym najniższym lokancie starszego pierścienia lub układu pierścieni itd.;
(e) spośród dwóch grup znajdujących się przy tym samym atomie szkieletu (w dwupodstawionej pozycji geminalnej) najpierw przypisuje się numery atomom grupy większej (zawierającej więcej atomów w szkielecie); jeżeli w dalszym ciągu istnieje wybór, to należy zastosować system alfanumeryczny (P-14.5). Jeżeli dwie grupy są identyczne i są przyłączone do stereomacierzystej struktury właściwie narysowanej (patrz Załącznik 3), pierwszą numerowaną jest grupa stereochemicznie α (zgodnie z P-101.2.6). W przypadku dwóch

identycznych grup przyłączonych do acyklicznego terminalnego wiązania podwójnego, pierwszą numerowaną jest grupa '*trans*' do głównego łańcucha, jak opisano we wskazaniach nomenklaturowych karotenoidów (reguła 12.4, lit. 40).

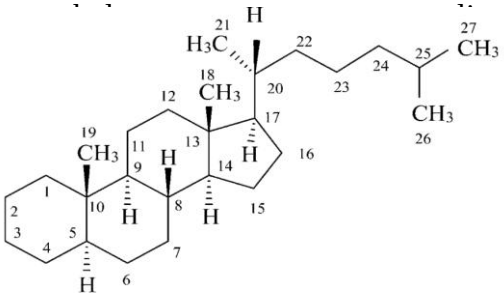
P-101.2.4 Identyfikacja poszczególnych pierścieni

Ponieważ lokanty stosuje się do opisu modyfikacji szkieletu, jak podano w P-101.3, nie zaleca się dalszego stosowanie używanego poprzednio oznaczenia pierścieni literami A, B, C itd., z wyjątkiem specjalnych przypadków np. usuwania końcowego pierścienia (patrz P-101.3.6). Tym niemniej, dla zachowania ciągłości systemu, nazwy z użyciem liter do oznaczania pierścieni, tam gdzie jest to stosowne, są nadawane ale nie są już zalecane.

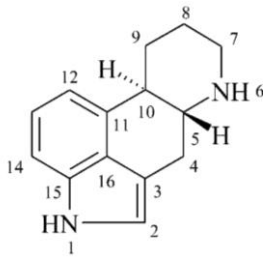
P-101.2.5 Łącznik atomowy, końcowy fragment i łącznik wiązaniowy

Do celów nomenklatury, podstawowe struktury macierzyste opisywane są przez specyficzne układy atomów lub grupy atomów nazywane: 'łącznikami atomowymi', 'fragmentami końcowymi' i 'łącznikami wiązaniowymi', które muszą być brane pod uwagę zgodnie z addytywnymi lub subtraktywnymi operacjami modyfikującymi podstawową strukturę macierzystą. Pod określeniem 'łącznik atomowy' rozumie się łańcuch homogenicznych (tego samego pierwiastka) atomów szkieletu łączący w każdej kombinacji przyczółki, atomy zwornikowe, pierścienie, układy pierścieni, podstawione atomy szkieletu w strukturze macierzystej lub heteroatomy. 'Końcowym fragmentem' struktury szkieletu jest acykliczny fragment homogenicznych atomów szkieletu, mający na jednym końcu cechy struktury kończących łączniki atomowe. Przez 'łączniki wiązaniowe' rozumie się połączenie pomiędzy różnymi kombinacjami przyczółków lub atomów zwornikowych, pierścieni, lub układów pierścieni, podstawionych atomów szkieletu, lub heteroatomów. Struktury przedstawione poniżej ilustrują łączniki atomowe, łączniki wiązaniowe i fragmenty końcowe. Zastosowanie tych terminów jest również prezentowane w P-101.3.1 w stosunku do usuwania atomów szkieletu określanych przedrostkiem 'nor'.

Przykłady:



cholestan



ergolina

łącznik atomowy:
w cholestanie: 1-4, 6-7, 11-12, 15-16 i 22-24
w ergolinie: 2, 4, 7-9, i 12-14

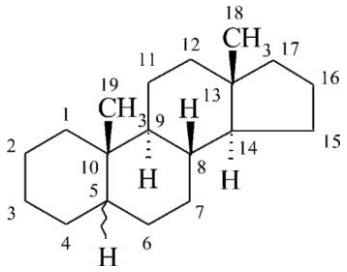
fragment końcowy:
w cholestanie: 18, 19, 21, 26 i 27
w ergolinie: brak

łączniki wiązaniowe :

w cholestanie: 5-10, 8-9, 8-14, 9-10, 13-14, 13-17 i 17-20
w ergolinie: 1-15, 3-16, 5-6, 5-10, 10-11, 11-16 i 15-16

P-101.2.6 Stereochemiczna konfiguracja struktur macierzystych

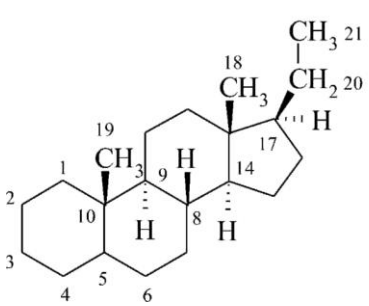
Nazwa podstawowej struktury macierzystej zazwyczaj zawiera konfiguracje absolutne wszystkich centrów chiralności i konfiguracje wiązań podwójnych, jeżeli występują, bez dalszych specyfikacji, np. pozycja '5' w steroidach jest zazwyczaj nieokreślona, musi być jednak określana w nazwach preferowanych przez IUPAC. Atom lub grupa atomów znajdująca się poniżej płaszczyzny pierścienia lub planarnych i *quasi* planarnych układów pierścieni określana jest jako 'α', natomiast atom lub grupę atomów powyżej tej płaszczyzny określa się jako 'β'. Stosowanie tej reguły wymaga orientacji struktur macierzystych jak podano w przykładach w załączniku 3. Wynikające z tej reguły konfiguracje, w przykładzie podanym poniżej, dla określonych atomów wodoru i grup metylowych w pozycjach 8, 10, 13 określone są jako 'β', a w pozycjach 9 i 14 jako 'α'. Konfiguracja atomu wodoru w pozycji 5 jest nieznana i jego orientacja określona literą ξ (ksi), oznaczona jest na rysunku falującą kreską. Stereodeskryptory α, β i ξ stosowane do opisu domniemanej lub określonej konfiguracji umieszcza się bez nawiasu przed nazwą podstawowej struktury macierzystej. Symbole α, β są stosowane, jak określono powyżej i rozszerzone na określenie różnych aspektów modyfikacji strukturalnej podstawowych struktur macierzystych.



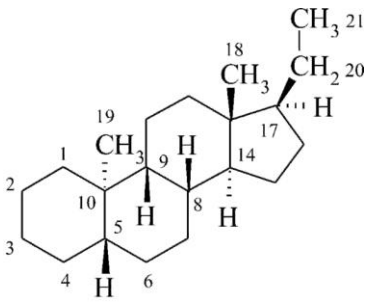
P-101.2.6.1 Konfiguracje różne od tych w strukturach macierzystych

P-101.2.6.1.1 System 'α, β' stosuje się do określania konfiguracji centrów chiralności jak opisano powyżej lub zgodnie z rekomendacjami IUPAC – IUBMB dla nomenklatury steroidów (lit. 16). Każde centrum chiralności jest opisane stereodeskryptorem α, β lub ξ określającym konfiguracje, które muszą być oznaczone i konfiguracje odwróconych. Symbole α, β lub ξ poprzedzone odpowiednimi lokantami umieszcza się na początku nazwy podstawowej struktury macierzystej. W przedstawionych poniżej przykładach konfiguracja przy C-5 musi być określona. Konfiguracje przy zwornikowych atomach węgla C-9 i C-10 w 5β,9β,10α-pregnanie są odwrócone, kiedy porówna się je z konfiguracjami podstawowej struktury macierzystej. Ta metoda jest preferowana w stosunku do alternatywnej przedstawionej w P-101.2.6.1.2.

Przykłady:



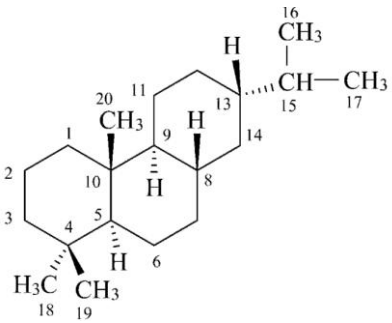
pregnan
(podstawowa struktura macierzysta)



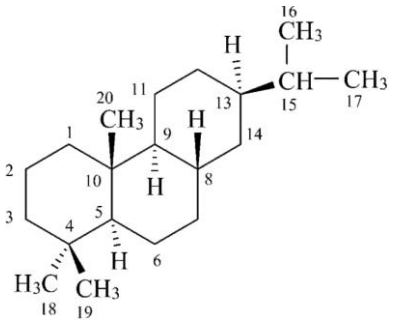
5β,9β,10α-pregnan

Zmianę konfiguracji nie zwornikowego bocznego łańcucha, który jest częścią struktury macierzystej, określa się metodą opracowaną dla C-17 steroidów (patrz 3*S*-5.2 lit. 16), w której α lub β informuje o położeniu względem płaszczyzny łańcucha bocznego, a nie atomu wodoru w tej samej pozycji.

Przykłady:



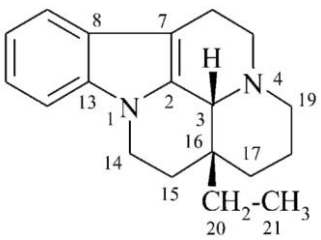
abietan
(podstawowa struktura macierzysta)



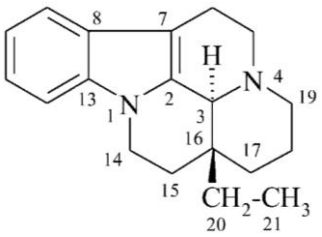
13β-abietan

P-101.2.6.1.2 Inwersję konfiguracji jednego ze stereogenicznych centrów, którego konfiguracja jest domniemana lub ustalona w nazwie podstawowej struktury macierzystej można wskazać pisanym kursywą przedrostkiem '*epi*' (pochodzącym od 'epimer'). Przedrostek '*epi*' poprzedzony lokantem atomu o inwertowanej konfiguracji umieszcza się przed nazwą struktury macierzystej. 13β-Abietan opisany powyżej w P-101.2.6.1.1 można również nazwać 13-*epi*-abietanem.

Przykłady:



eburnamenina
(podstawowa struktura macierzysta)



3-*epi*-eburnamenina
3α-eburnamenina

P-101.2.6.1.3 Stereodeskryptory '*R*' i '*S*'.

Stereodeskryptory '*R*' i '*S*' stosuje się do opisu konfiguracji absolutnej nie określonej przez przedstawiony powyżej system 'α, β', zgodnie z regułą CIP (**C**ahna-**I**ngolda-**P**reloga) na podstawie pierwszeństwa podstawników i zgodnie z zasadami opisanymi w P-9. Stereodeskryptory '*R*' i '*S*' stosuje się również wtedy, kiedy w wyniku otwarcia pierścienia tworzą się dwa centra chiralności, z których jedno może się zmieniać jak opisano dla witaminy D w P-101.8.4.

P-101.2.7 Semi-systematyczne nazwy rekomendowanych struktur macierzystych są zamieszczone w Tabeli 10.1. Struktury tych połączeń są przedstawione w Załączniku 3.

Tabela 10.1 Nazwy podstawowych struktur stereomacierzystych (lista nie ograniczająca)

(a) alkaloidy

akonitan
ajmalan
akuammilan
alstofilan
aporfina
aspidofraktydyna
aspidospermidyna
atydane
atyzyna
berbaman
berbin
cefalotaksyna
cewan
chelidonina
cynchonan
dafnan
dendroban
eburnamenina
emetan
ergolina
ergotaman
erytrynan
ewonimina
ewonina
formozanan
galantamina
galantan
hasubanan
hetysan
ibogamin
johimban
konanina
kopsan
korynan
korynoksan
krynan
kuran
likopodan
likorenan
litran
litranidyna
lunaryn
matrydyna
morfinan
nufarydyna
18-oksajohimban
oksyakantan
ormozanin
pankracyna
readan
rodiazyna
samandaryn
sarpagan
senecionan
solanidyna
sparteina
spirosolan
strychnidyna
tazetyna
tropan
tubokuran
tubulozan
weratraman
winkaleukoblastyna
winkan
wobazan
wobtuzyn

(b) steroidy

androstan
bufanolid
cholan
cholestan
ergostan
estran
furostan
gonan
gorgostan
kampestan
kardanolid
poriferastan
pregnan
spirostan
stigmastan

(c) terpeny (z wyjątkiem retinalu wszystkie są macierzystymi wodorkami)

abietan
ambrozan
arystolan
atyzan
bejeran
bisabolan
bornan
kadynan
karan
β,φ – karoten*
β,ψ – karoten*
ε,κ - karoten*
dammaran
eremofilan
eudesman
fenchan
gammaceran
germakran
gibban
grajanotoksan
gwajan
himachalan
hopan
humulan
lupan
mentan (*p*-izomer)
oleanan
ofiobolan
pikrazan
pimaran
pinan
podokarpan
protostan
retynal
rozan
taksan

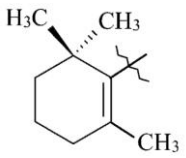
ε,χ - karoten*	kauran	tujan
kariofilan	labdan	trichotekan
cedran	lanostan	ursan
dryman		

(d) inne (wszystkie to macierzyste wodorki poza cefamem i penamem)

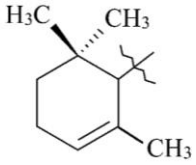
21*H*-bilin	neoflawan
cefam	neolignan
koryn	penam
flawan	prostan
izoflawan	porfiryn
lignan	tromboksan

---

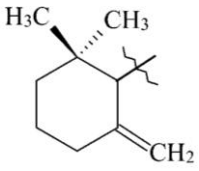
*Przykłady czterech różnych karotenów; możliwych jest 28 macierzystych struktur karotenu, pochodnych wszystkich permutacji siedmiu grup końcowych przedstawionych poniżej:



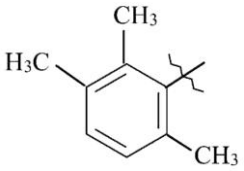
β (beta)



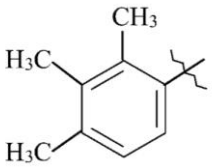
ε (epsilon)



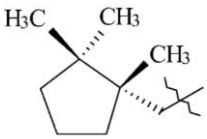
γ (gamma)



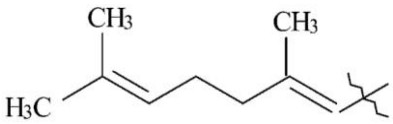
Φ (phi)



χ (chi)



κ (kappa)



ψ (psi)

P-101.3 MODYFIKACJE SZKIELETU STRUKTUR MACIERZYSTYCH

P-101.3.0 Wprowadzenie
P-101.3.1 Usuwanie atomów szkieletu
P-101.3.2 Addycja atomów szkieletu
P-101.3.3 Tworzenie wiązania
P-101.3.4 Rozerwanie wiązania
P-101.3.5 Migracja wiązania

P-101.3.6 Usuwanie końcowego pierścienia
P-101.3.7 Łączenie przedrostków ‘cyklo’, ‘seko’, ‘apo’, ‘homo' i 'nor’

P-101.3.0 Wprowadzenie

Szkielet struktur macierzystych może być modyfikowany na wiele sposobów, może być zwiększany, zmniejszany lub przegrupowywany w wyniku różnych operacji strukturalnych opisanych w P-13. Operacje te są odzwierciedlane w nazwach przez przedrostki, rozłączne i nierozłączne, dodawane do nazw struktur macierzystych. Zmiany dotyczące konfiguracji muszą być również wprowadzone, tak jak wskazano w P-101.2.6. W nomenklaturze produktów naturalnych liczba operacji nie jest limitowana.

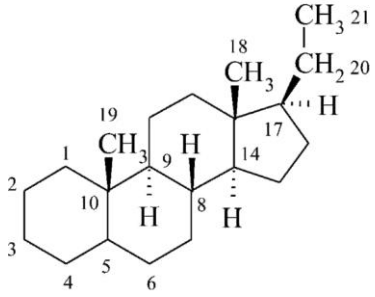
Ten rozdział zastępuje reguły Części F (lit. 9) i reguły A-71 do A-75 odnoszące się do węglowodorów terpenowych przedstawionych w zaleceniach z 1979 roku (lit. 1).

P-101.3.1 Usuwanie atomów szkieletu bez zmiany liczby pierścieni

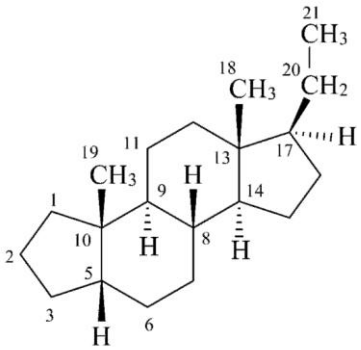
P-101.3.1.1 Usunięcie niepodstawionego nasyconego lub nienasyconego atomu ze szkieletu pierścienia lub niepodstawionego atomu z nasyconego acyklicznego fragmentu podstawowej struktury macierzystej wraz z przyłączonymi do niego atomami wodoru wskazuje nierozdzielny przedrostek ‘nor’. Utratę dwóch lub więcej atomów szkieletu wskazują zwykłe przedrostki zwielokrotniające ‘di’, ‘tri’ itd. dodane do przedrostka ‘nor’.

Pozycja usuniętego atomu jest oznaczona we wszystkich przypadkach przez podanie jego lokantu w ponumerowanej podstawowej strukturze macierzystej. Jakkolwiek podaje się lokant każdego usuniętego atomu szkieletu i jednoznaczną nazwę można utworzyć przez usunięcie dowolnego atomu szkieletu, atomu węgla lub heteroatomu, to zwyczajowo z łącznika atomowego w cyklicznej części szkieletu struktury usuwa się atomy z możliwie najwyższym lokantem. W karotenoidach, jako wyjątek, lokant przypisany do ‘nor’ jest najniższym z możliwych (patrz Nomenklatura Karotenoidów, reguła 5.1, lit. 40).

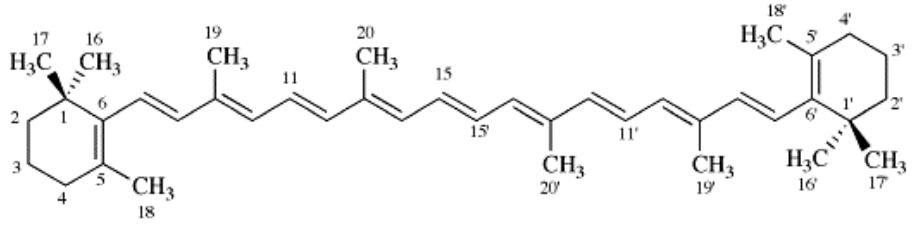
Przykłady:



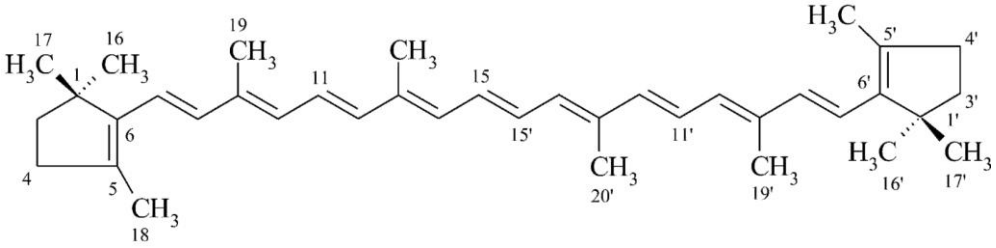
pregnan
(podstawowa struktura macierzysta)



4-nor-5β-pregnan



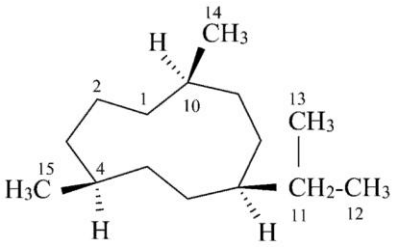
β,β-karoten
(podstawowa struktura macierzysta)



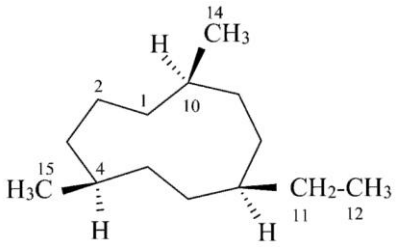
2,2′-dinor-β,β-karoten

W acyklicznej części struktury szkieletu usuwanym atomem jest ten z acyklicznego łącznika atomowego lub końcowego fragmentu, który jest najbliższy wolnego końca części acyklicznej (tak aby utrzymać, jak tylko to jest możliwe, zbieżne numeracje związku wyjściowego i uzyskanego w wyniku operacji strukturalnej).

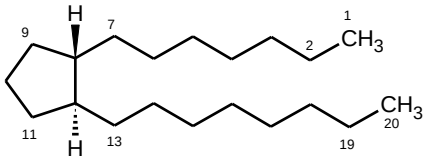
Przykłady:



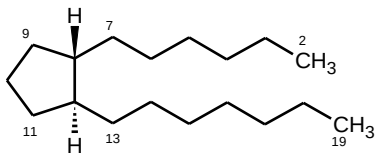
germakran
(podstawowa struktura macierzysta)



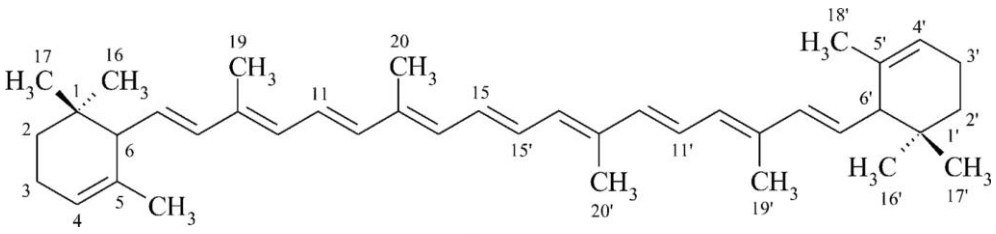
13-norgermakran
(1*R*,4*s*,7*S*)-4-etylo-1,7-dimetylocyklodekan
(pozycja 1 jest pozycją 10 dla germakranu)



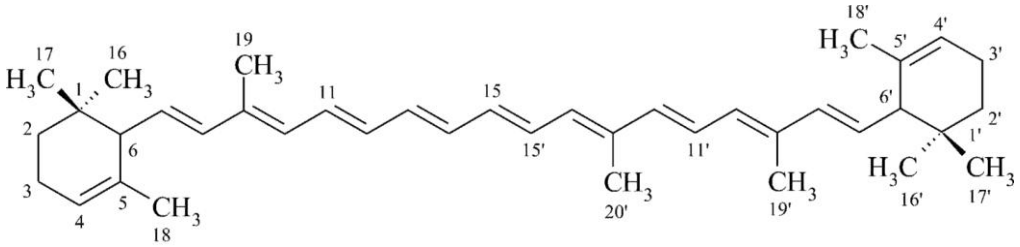
prostan
(podstawowa struktura macierzysta)



1,20-dinorprostan
(1*S*,2*S*)-1-heptylo-2-heksylocyklopentan



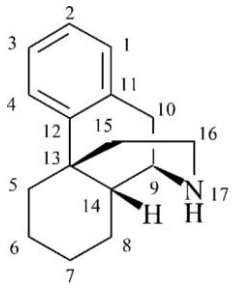
ε,ε-karoten
(podstawowa struktura macierzysta)



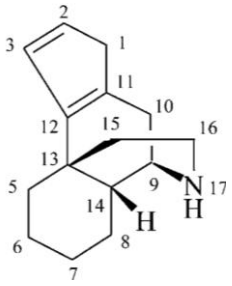
20-nor-ε,ε-karoten
(stosowanie nieprimowanych i primowanych lokantów patrz P-14.3.5)

P-101.3.1.2 Usuniecie nienasyconego atomu szkieletu z pierścienia zawierającego maksymalną liczbę nieskumulowanych wiązań podwójnych w podstawowej strukturze macierzystej skutkuje utworzeniem nasyconej pozycji w pierścieniu, którą opisuje wskazany atom wodoru (patrz P-14.7). W nazwach symbol *H* (pisany kursywą) poprzedzony właściwym lokantem podaje się na początku nazwy zmodyfikowanej struktury jako nierozłączny przedrostek.

Przykład:



morfinan
(podstawowa struktura macierzysta)



1*H*-4-normorfinan

P-101.3.2 Addycja atomu szkieletu bez wpływu na liczbę pierścieni

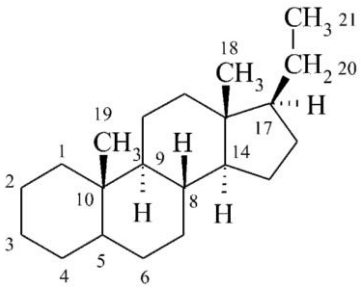
P-101.3.2.1 Addycję grupy metylenowej (-CH_2-) pomiędzy dwa atomy szkieletu podstawowej struktury macierzystej opisuje nierozłączny przedrostek ‘homo’; addycję dwóch lub więcej grup metylenowych wskazują przedrostki zwielokrotniajace ‘di’, ‘tri’ itd. Pozycje wprowadzonych grup metylenowych w zmodyfikowanej podstawowej strukturze macierzystej wskazuje się lokantami umieszczonymi przed przedrostkiem ‘homo’ i poprzedzonymi przedrostkiem zwielokrotniającym, jeżeli to jest konieczne. Przypisanie lokantów dodanym grupom metylenowym zależy od tego czy jest ona włączona do atomowego łącznika, czy do końcowego acyklicznego fragmentu, czy też w łącznika wiązaniowego.

P-101.3.2.2 Numerowanie dodatkowych atomów szkieletu

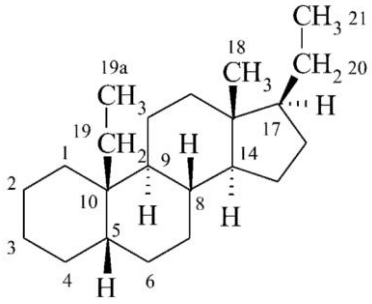
P-101.3.2.2.1 Grupy metylenowe włączone w łącznik atomowy lub końcowy fragment struktury oznacza się dodając litery ‘a, b’ itd. do lokantu atomu szkieletu o najwyższym numerze, będącego łącznikiem atomowym lub końcowym fragmentem zgodnie z położeniem wiązań podwójnych pozostających w strukturze. Jeżeli są dwa równoważne łączniki atomowe wybiera się najwyższy atomowy łącznik i grupa metylenowa jest wprowadzana po atomie szkieletu z najwyższym lokantem w tym łączniku.

Dodanie acyklicznych bocznych łańcuchów lub rozszerzenie końcowego fragmentu bocznego łańcucha już przyłączonego do stereomacierzystego wodorku może być także oznaczone zgodnie z zasadami nomenklatury podstawnikowej. Dodawane podstawniki są numerowane, jak opisano powyżej, dla ‘homo’ atomów.

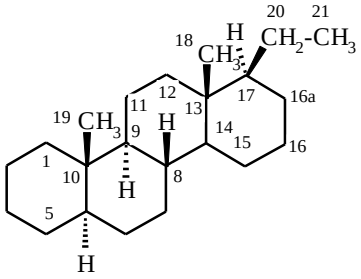
Przykłady:



pregnan
(podstawowa struktura macierzysta)



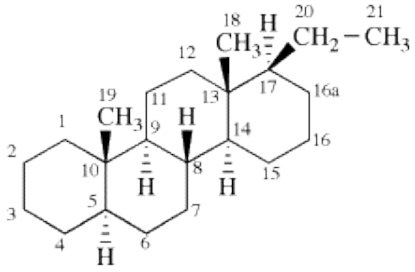
19a-homo-5β-pregnan
(nie 19-metylo-5β-pregnan; wydłużenie bocznego łańcucha jest niedozwolone)



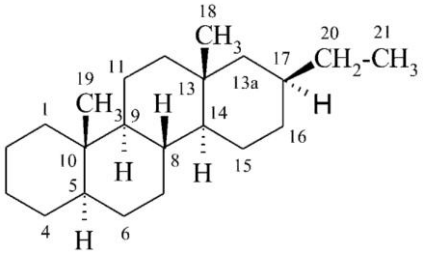
16a-homo-5α-pregnan

P-101.3.2.2.2 Grupy metylenowe włączone w łącznik wiązaniowy oznacza się wymieniając lokanty obu atomów szkieletu tworzących to wiązanie zamykając drugi (wyższy) numer w nawiasie, z literami ‘a,b’ itd. (poza nawiasem) zgodnie z liczbą grup metylenowych.

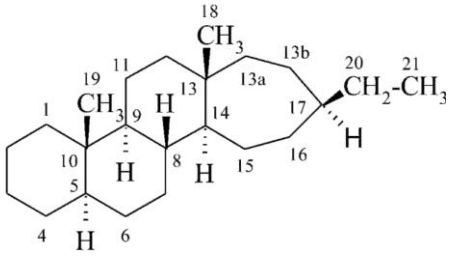
Przykłady:



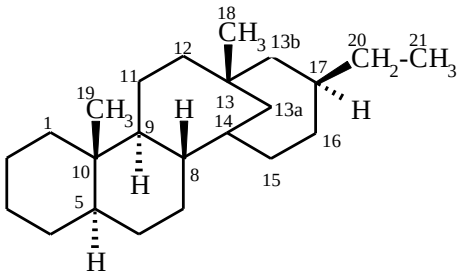
pregnan
(podstawowa struktura macierzysta)



13(17)a-homo-5α-pregnan



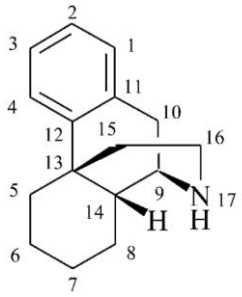
13(17)a,13(17)b-dihomo-5α-pregnan
[był nazywany D(17a,17b)dihomo-5α-pregnan; patrz reguła 2S-7.3, lit. 16]



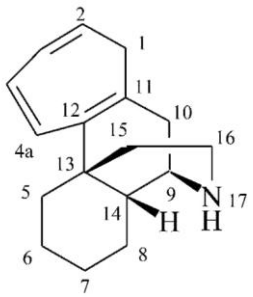
13(14)a,13(17)b-dihomo-5α-pregnan

P-101.3.2.2.3 Wprowadzenie grupy metylenowej do pierścienia lub układu pierścieni (zawierających maksymalną liczbę nieskumulowanych wiązań podwójnych) lub do układu sprzężonych wiązań podwójnych, może utworzyć pozycję nasyconą w pierścieniu, którą opisuje się wskazanym atomem wodoru (patrz P-14.7 i P-58.2). Miejsce grupy metylenowej jest określone przez regułę P-101.3.2.2 nawet wtedy, gdy pozycja nasycona znajduje się gdziekolwiek w układzie nienasyconego pierścienia. Określona jest ona lokantem wskazanego atomu wodoru. To jest zmiana dla nazw homoporfiryn (patrz lit. 17, reguła TP-5.1). Dwie tautomeryczne formy (**A**) i (**B**) przedstawione poniżej, są właściwie ponumerowane i nazwane.

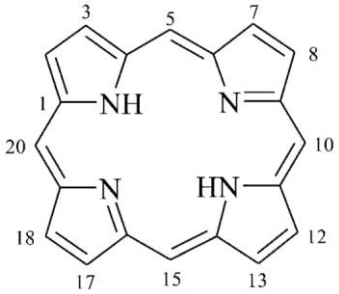
Przykłady:



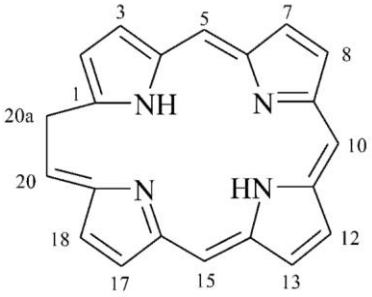
morfinan
(podstawowa struktura macierzysta)



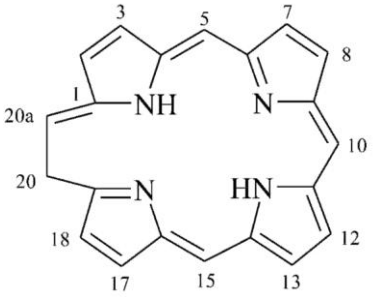
1*H*-4a-homomorfinan



porfiryna
(podstawowa struktura macierzysta)



(A) 20a*H*-20a-homoporfiryna



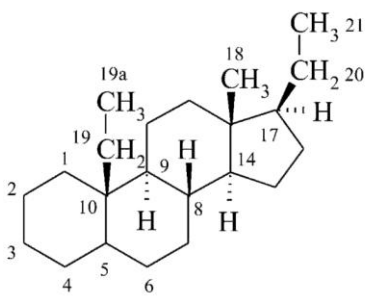
(B) 20*H*-20a-homoprofiryna

P-101.3.3 Tworzenie wiązań

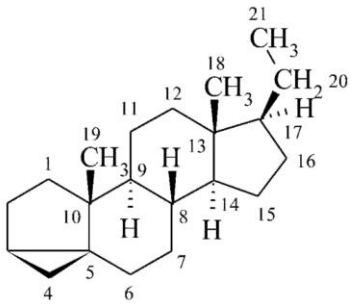
Tworzenie dodatkowego pierścienia w wyniku operacji łączenia (patrz P-13.5.3), w sensie tworzenia bezpośredniego wiązania między dwoma jakimikolwiek atomami struktury macierzystej opisuje się nierozłącznym przedrostkiem ‘cyklo’ (pisanym normalnie) poprzedzonym lokantami połączonych atomów. Kiedy potrzeba, konfigurację centrum chiralności utworzonego przez nowe wiązanie opisuje się deskryptorami α, ß i ξ zgodnie z P-1-1.2.6, lub metodą CIP (*R*, *S*) zgodnie z P-101.2.6.1.3.

Konfiguracje podstawowej struktury macierzystej pozostają bez zmian. Nowe konfiguracje atomów pierścienia posiadających jeden atom wodoru, dalej obecny, określa się deskryptorami α lub ß jak opisano w P-101.2.6 lub, jeżeli to konieczne, metodę sekwencji (*R*, *S*). Położenie atomu wodoru poniżej (α) lub powyżej (ß) płaszczyzny układów pierścieni wskazuje właściwy symbol i duża litera *H* (pisana kursywą) poprzedzona lokantem atomu w strukturze pierścienia, wszystko zamknięte w nawiasie i podane przed odpowiednim przedrostkiem, w tym przypadku ‘cyklo’ (przedrostek ‘abeo’ patrz P-101.3.5.1). Metoda przedstawiona powyżej różni się od tej stosowanej w nomenklaturze steroidów (reguła 3S-7.5, lit. 16).

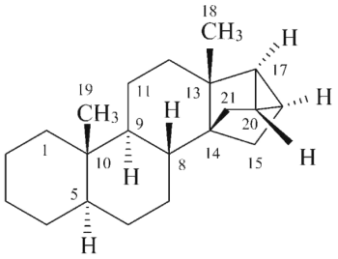
Przykłady:



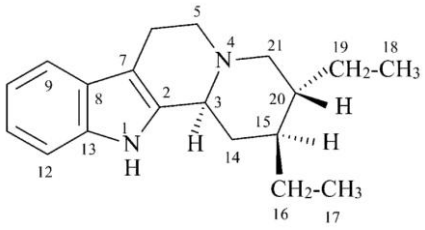
pregnan
(podstawowa struktura macierzysta)



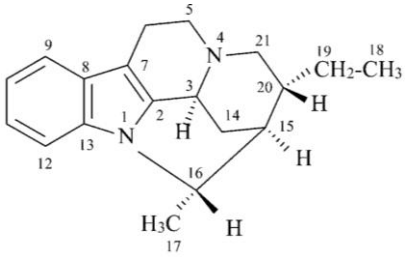
3α,5-cyklo-5α-pregnan



(20*S*)-14,21:16β,20-dicyklo-5α,14β-pregnan



korynan
(podstawowa struktura macierzysta)

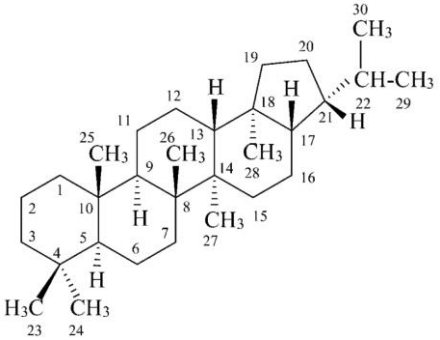


(16β*H*)-1,16-cyklokorynan

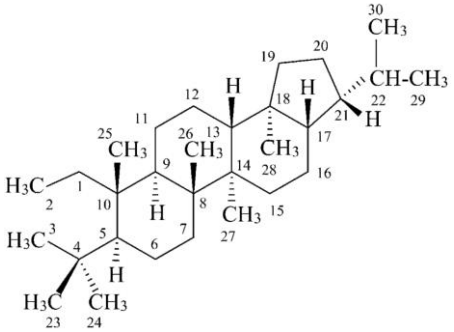
P-101.3.4 Rozerwanie wiązania

P-101.3.4.1 Rozerwanie wiązania pierścienia (nasyconego lub nienasyconego) z dodaniem odpowiedniej liczby atomów wodoru do każdej utworzonej nowej grupy końcowej wskazuje się nierozłącznym przedrostkiem ‘seko’ (nie kursywą) i lokantami rozerwanego wiązania. Zachowane jest numerowanie wyjściowej struktury.

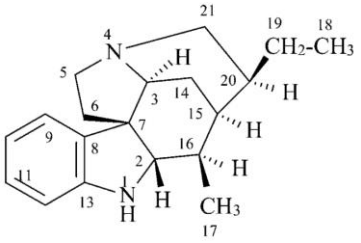
Przykłady:



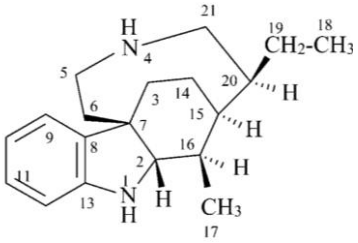
hopan
(podstawowa struktura macierzysta)



2,3-sekohopan



kuran
(podstawowa struktura macierzysta)



3,4-sekokuran

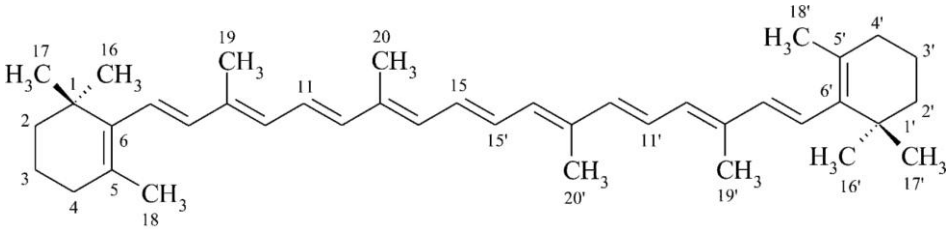
P-101.3.4.2 Przedrostek ‘apo’

Przedrostek ‘apo’ pisany normalną czcionką, poprzedzony lokantem, stosuje się do wskazania usunięcia całego bocznego łańcucha z podstawowej struktury macierzystej od atomu szkieletu o wskazanym lokancie. Usunięcie dwóch lub więcej bocznych łańcuchów wskazuje się przedrostkami ‘diapo’, ‘triapo’ itd. poprzedzonymi właściwymi lokantami. W powstałym po odłączeniu grup fragmencie zachowana jest numeracja atomów szkieletu podstawowej struktury macierzystej.

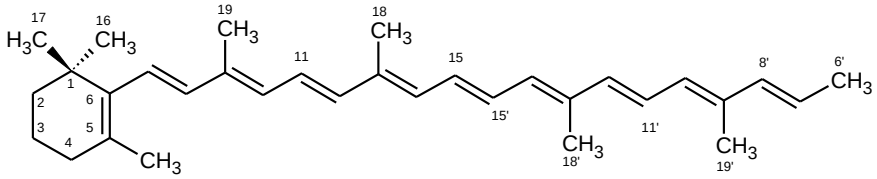
W nomenklaturze karotenoidów do opisu tej operacji stosowane jest następujące postępowanie (patrz lit. 40, reguła 10, Karotenoidy). Pisany normalną czcionką przedrostek ‘apo’, poprzedzony lokantem, jest stosowany do wskazania, że cały fragment cząsteczki poza atomem węgla o wskazanym lokancie został zastąpiony atomami wodoru. Grupa metylowa bocznego łańcucha nie jest traktowana jako leżąca ‘poza’ atomem węgla, do którego jest przyłączona. Usunięcie fragmentów z obu końców cząsteczki karotenoidów wskazuje się numerycznym przedrostkiem zwielokrotniającym ‘di’ poprzedzonym dwoma lokantami. Numeracja atomów szkieletu otrzymanego fragmentu struktury macierzystej pozostaje niezmieniona.

Przedrostek i jego lokant bezpośrednio poprzedzają nazwę macierzystą dopóki lokant związany z przedrostkiem ‘apo’ nie jest większy niż 5. Jeżeli jest większy, to nie jest konieczne podawanie greckich liter określających końcowe grupy cząsteczki.

Przykład:



β,β-karoten
(podstawowa struktura macierzysta)



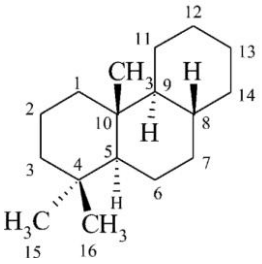
6′-apo-β-karoten
(zastosowanie nieprimowanych i primowanych lokantów patrz P-14.3.4)

P-101.3.5 Migracja wiązań

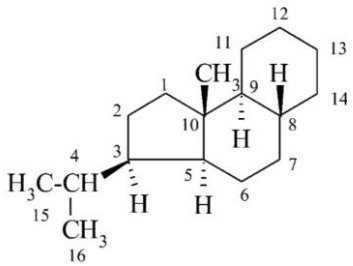
Struktury macierzyste nie będące prostymi pochodnymi zaakceptowanych podstawowych struktur macierzystych, lecz mogące być rozważane jako wywodzące się ze struktur macierzystych w wyniku migracji jednego lub więcej wiązań, można nazywać w następujący sposób.

P-101.3.5.1 Nierozłączny przedrostek ‘x(y→z)-abeo’ wskazuje migrację od jednego końca pojedynczego wiązania z jego wyjściowej pozycji w podstawowej strukturze macierzystej do innej pozycji. W przedrostku, ‘x’ oznacza lokant stacjonarnego, to jest nie wędrującego końca migrującego wiązania; ‘y’ jest lokantem pozycji wędrującego końca wiązania w macierzystej (wyjściowej) strukturze, a ‘z’ jest lokantem pozycji wędrującego końca wiązania w otrzymanej, nowej strukturze. Numeracja początkowej podstawowej struktury macierzystej jest zachowana. Poprzednio przedrostek ‘abeo’ był pisany kursywą (reguła F-4.8, literatura 1; reguła R-1.2.7.1, literatura 2). Dla spójności z innymi modyfikującymi strukturę przedrostkami obecnie zalecane jest pisanie go normalną rzymską czcionką. Nomenklatura ‘abeo’ opisana w tej regule jest wygodna do stosowania w dyskusji nad mechanizmami reakcji i biogenezie.

Przykład:



podokarpan
(podstawowa struktura macierzysta)



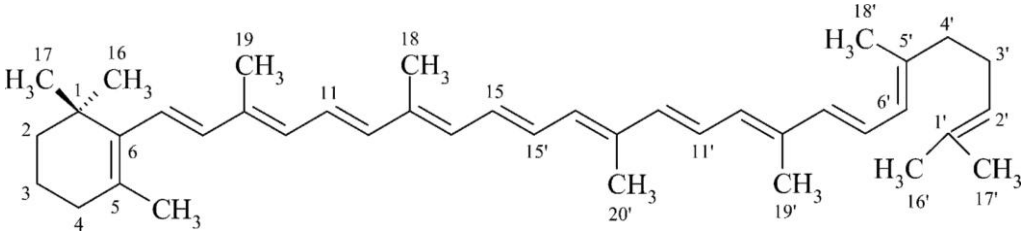
(3α*H*)-5(4→3)-abeo-podokarpan
3,5-cyklo-4,5-seko-3β-podokarpan

P-101.3.5.2 Pisany kursywą przedrostek ‘*retro*’ poprzedzony parą lokantów jest stosowany do wskazania przesunięcia o jedną pozycję wszystkich pojedynczych i podwójnych wiązań w sprzężonym polienowym układzie ograniczonym parą lokantów; sprzężony polienowy układ wiązań nie może być częścią układu z maksymalną liczbą nieskumulowanych podwójnych wiązań w pierścieniu lub układzie pierścieni.

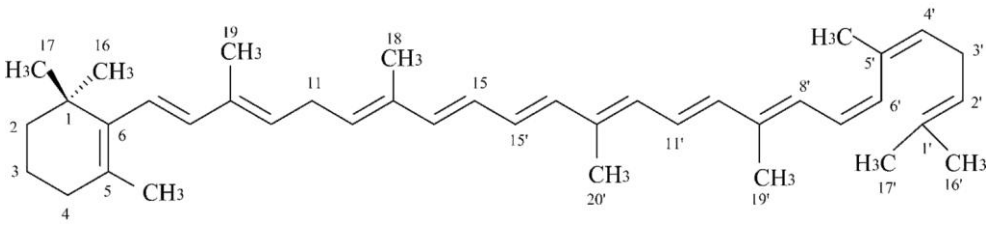
Pierwszym lokantem jest oznaczony atom szkieletu, który utracił atom wodoru, a drugim lokantem atom, który uzyskał atom wodoru.

Przedrostek ‘*retro*’ stosuje się w ten sposób tylko w nomenklaturze karotenoidów (patrz Karotenoidy reguła 9, lit. 9).

Przykład:



β,ψ-karoten
(podstawowa struktura macierzysta)

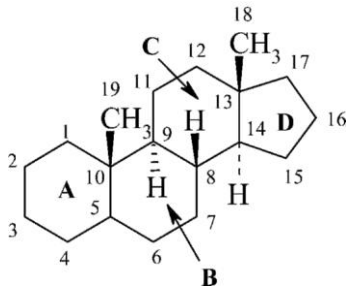


4′,11-*retro*-β,ψ-karoten
(patrz P-16.9 dla zastosowanie nieprimowanych i primowanych lokantów)

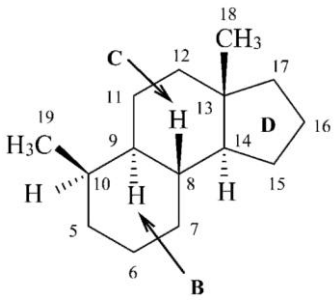
P-101.3.6 Usuwanie końcowego pierścienia

Usunięcie końcowego pierścienia ze struktury macierzystej i dodanie właściwej liczby atomów wodoru przy każdym połączeniu z sąsiednim pierścieniem wskazuje się nierozłącznym przedrostkiem ‘des’, który poprzedza duża litera oznaczającą usuwany pierścień (stosowanie przedrostka ‘des’ w nomenklaturze peptydów patrz P-103.3.5.4). Jest to jedyny przypadek w nomenklaturze, kiedy duże litery są w dalszym ciągu stosowane do identyfikacji pierścieni w strukturach macierzystych. Stereochemia wynikająca z nazwy stereomacierzystej struktury pozostaje niezmieniona, chyba, że jest określona w inny sposób. W zmodyfikowanej strukturze zachowana jest numeracja atomów szkieletu struktury macierzystej. Stosowanie przedrostka ‘des’ jest zastrzeżone dla steroidów.

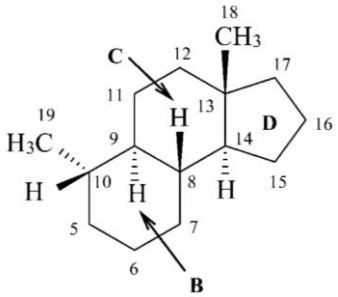
Przykład:



androstan
(podstawowa struktura macierzysta)



des-*A*-androstan



des-*A*-10α-androstan

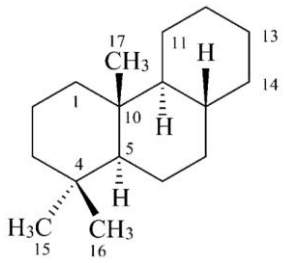
P-101.3.7 Łączenie przedrostków ‘cyklo’, ‘seko’, ‘apo’, ‘homo’ i ‘nor’

Modyfikacje podstawowych struktur macierzystych opisane przedrostkami w przedstawionych poprzednio wskazaniach (P-101.3.1 do P-101.3.4) można być łączyć aby opisać bardziej złożone

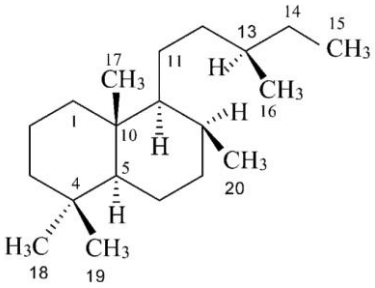
zmiany w strukturze. Operacja strukturalna wskazana przez każdy przedrostek, ‘cyklo’, ‘seko’, ‘apo’, i ‘nor’, jest stosowana w stosunku do podstawowej struktury macierzystej sekwencyjnie, posuwając się ‘naprzód do tyłu’, to znaczy poruszać się od strony prawej do lewej, od nazwy podstawowej struktury macierzystej.

P-101.3.7.1 W przypadku kiedy różne kombinacje przedrostków ‘cyklo’, ‘seko’, ‘apo’, ‘homo’ i ‘nor’ mogą być zastosowane do opisu tej samej modyfikacji podstawowej struktury macierzystej, wybiera się kombinację zawierającą najmniejszą liczbę operacji. Obydwa rodzaje przedrostków, rozłączne (np. alkilo) jak i nierozłączne (np. homo lub nor), można stosować do opisu modyfikacji lecz preferowane są przedrostki rozłączne. ‘Dihomo’, ‘dinor’ itd. są rozumiane jako dwie modyfikacje każda (patrz lit. 16, reguła 3.S-6.3). Kiedy liczba operacji jest ta sama, połączenie homo/nor preferuje się w stosunku do cyklo/seko; wybór pomiędzy innymi kombinacjami wyrażającymi tą samą liczbę operacji jest oparty na alfabetycznej kolejności przedrostków.

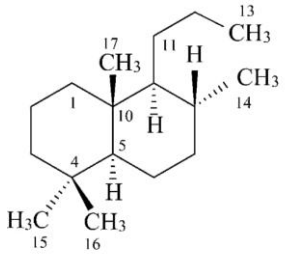
Przykłady:



podokarpan
(podstawowa struktura macierzysta)

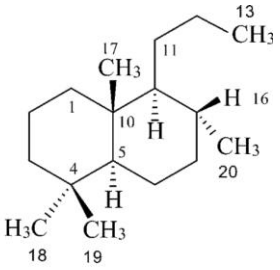


labdan
(podstawowa struktura macierzysta)



(I)

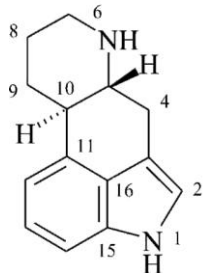
≡≡



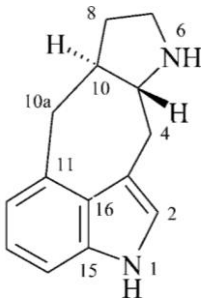
(II)

13,14-sekopodokarpan (**I**) nie 8α-14,15,16-trinorlabdan (**II**)

Wyjaśnienie: Podokarpan może być przekształcony do ‘seko’ (**I**) w wyniku jednej operacji; ten sam związek (**II**) może być otrzymany z labdanu, ale w trzech operacjach.



ergolina
(podstawowa struktura macierzysta)



10(11)a-homo-9-norergolina
5,9-cyklo-5,10-sekoergolina
(9H)-5(10→9)-abeoergolina

P-101.3.7.2 Kolejność wymieniania połączonych przedrostków modyfikujących strukturę, musi unikać niewłaściwego stosowania przedrostków zdefiniowanych powyżej ani nie może prowadzić do nieprawdopodobnych wyników kiedy odpowiednie operacje są przeprowadzone w przepisany powyżej sposób.

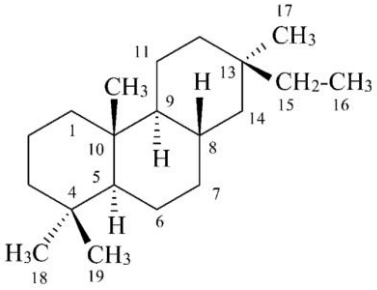
Po spełnieniu reguł P-101.3.7.1 i P-101.3.7.2 nierozłączne przedrostki wskazujące przegrupowania wiązań (cyklo i seko) wymienia się przed tymi, które wskazują addycję lub usuwanie atomów szkieletu struktury (homo i nor). Jeżeli konieczna jest więcej niż jedna z tych operacji, przedrostki wymienia się w porządku alfabetycznym przed nazwą podstawowej struktury macierzystej. Multiplicyjne przedrostki opisujące wielokrotne operacje tego samego rodzaju nie wpływają na ich kolejność w nazwie.

Preferowana semi-systematyczna nazwa powstaje w wyniku tylko dwóch operacji zawierających przedrostki ‘cyklo’, ‘seko’, ‘apo’, ‘homo’ i ‘nor’. W ogólnej nomenklaturze dozwolone są więcej niż dwie operacje. Nazwy zmodyfikowanych struktur tworzy się podając najpierw przedrostki opisujące przegrupowanie wiązań ‘cyklo’ i ‘seko’ (najdalej od macierzystej struktury) w porządku od lewej strony do prawej, a następnie przedrostki usuwania/dodawania ‘nor’ i ‘homo’ w porządku od lewej do prawej. Przedrostki podaje się przed nazwą struktury macierzystej. Schematycznie ten porządek jest następujący:

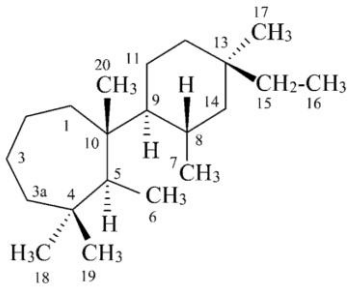
Operacja	przegrupowanie wiązań	addycja/usunięcie atomów szkieletu	struktura macierzysta
	cyklo, seko	apo, homo, nor	

Nazwy, w których porządek przedrostków jest ‘cyklo’, ‘seko’, ‘homo’, ‘nor’ są preferowane w stosunku do tych, w których przedrostki wymienione są w porządku alfabetycznym, a więc ‘apo’, ‘cyklo’, ‘homo’, ‘nor’, ‘seko’.

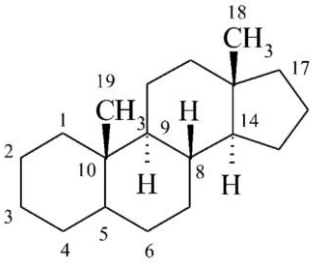
Przykłady:



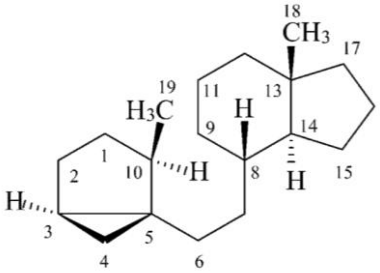
pimaran
(podstawowa struktura macierzysta)



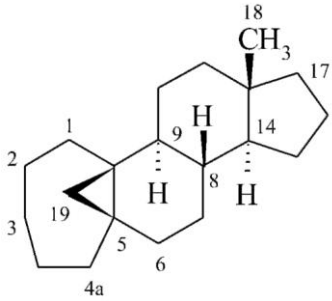
6,7-seko-3a-homopimaran
3a-homo-6,7-sekopimaran

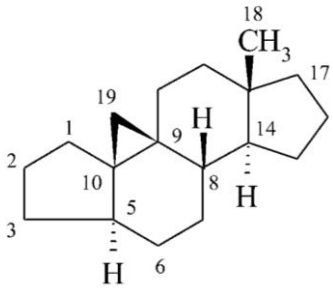


androstan
(podstawowa struktura macierzysta)



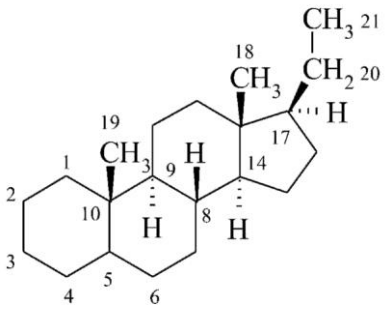
3α,5-cyklo-9,10-seko-5α-androstan



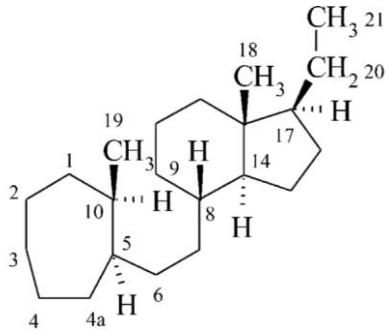


5β,19-cyklo-4a-homo-5β-androstan

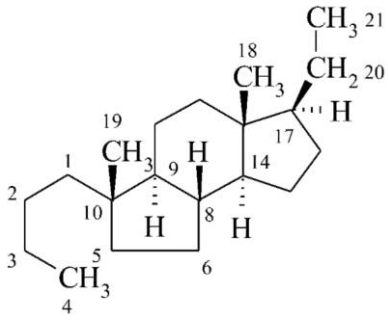
9β,19-cyklo-4-nor-5α,9β-androstan



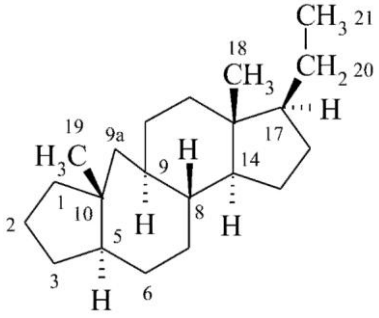
pregnan
(podstawowa struktura macierzysta)



9,10-seko-4a-homo-5α-pregnan



4,5-seko-7-norpregnan



9a-homo-4-nor-5α-pregnan

P-101.4 ZAMIANA ATOMÓW SZKIELETU

P-101.4.1 Ogólna metodologia
P-101.4.2 Zamiana atomów węgla szkieletu na heteroatomy
P-101.4.3 Zamiana heteroatomów szkieletu na atomy węgla
P-101.4.4 Zamiana heteroatomów szkieletu na inne heteroatomy
P-101.4.5 Wskazany atom wodoru

P-101.4.1 Ogólna metodologia

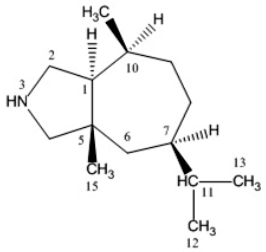
Reguły nomenklatury zamiennej ‘a’ szkieletu, która, jak opisano w P-15.4 i P-51.3 służy do modyfikacji struktur macierzystych, stosowane są w przypadku zastępowania atomów węgla szkieletu heteroatomami takimi jak O, S, N. W przeciwieństwie do zalecanej w poprawionej Części F (lit. 9) kolejności alfabetycznej nazw przedrostków zamiennych ‘a’, w nomenklaturze zamiennej zaleca się ich wymienianie według reguł starszeństwa określonych w P-15.4. Oprócz metodologii stosowanej do tworzenia nazw systematycznych, nomenklaturę zamienną ‘a’ szkieletu stosuje się w przypadku zamiany heteroatomów w strukturze macierzystej na atomy węgla lub inne heteroatomy.

P-101.4.2 Zamiana atomów węgla szkieletu na heteroatomy

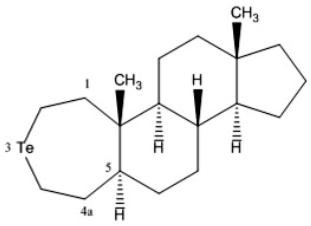
Heteroatomy wskazuje się przedrostkami zamiennymi ‘a’ które wymienia się przed przedrostkami nierozłącznymi modyfikującymi podstawową strukturę macierzystą, podając dla każdego z nich lokant wskazujący jego położenie; zachowana jest numeracja struktury macierzystej.

Nomenklaturę zamienną ‘a’ szkieletu można stosować po uwzględnieniu wszystkich modyfikacji szkieletu cząsteczki.

Przykłady:



3-azaambrozan

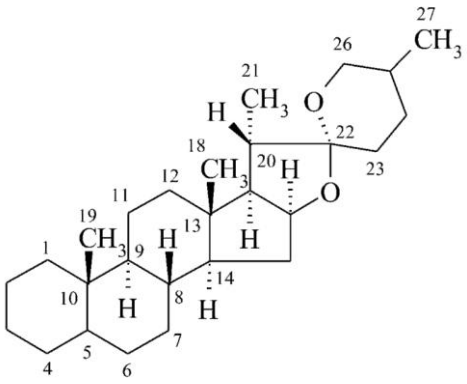


3-tellura-4a-homo-5α-androstan

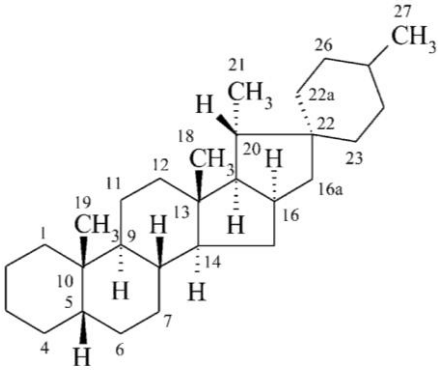
P-101.4.3 Zamiana heteroatomów szkieletu na atomy węgla

Zamianę heteroatomu w strukturze macierzystej na atom węgla wskazuje się przedrostkiem ‘karba’, z zachowaniem pierwotnej numeracji. Jeśli heteroatom w strukturze macierzystej nie posiadał lokantu, zastępującemu go atomowi węgla przypisuje się lokant złożony z najniższego lokantu spośród bezpośrednio związanych z nich atomów i litery ‘a’. Jeżeli sąsiedni atom węgla o niższym numerze jest tzw. ‘homo’ atomem, używa się odpowiednio liter ‘b’, ‘c’ etc. Konfigurację nowego atomu węgla w cząsteczce określa się metodami stosowanymi do określania dodatkowej konfiguracji (patrz P-101.2.6.1).

Przykłady:



spirostan
(podstawowa struktura macierzysta)

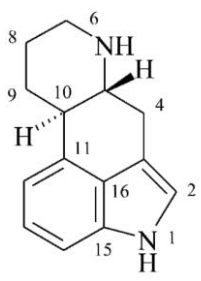


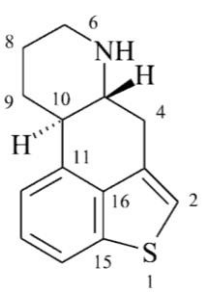
16a,22a-dikarba-5β-spirostan

P-101.4.4 Zamiana heteroatomów szkieletu na inne heteroatomy

Zastąpienie heteroatomu w cząsteczce stereomacierzystego wodorku innym heteroatomem wskazuje się podając odpowiedni przedrostek zamienny (‘a’) oraz lokant.

Przykład:





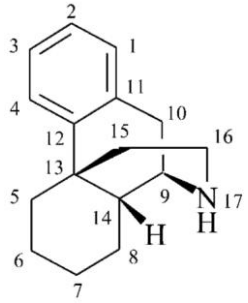
ergolina
(podstawowa struktura macierzysta)

1-tiaergolina

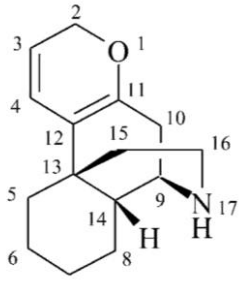
P-101.4.5 Wskazany atom wodoru

W przypadku, gdy zastąpienie atomu we fragmencie struktury macierzystej, zawierającym maksymalną liczbę nieskumulowanych wiązań podwójnych lub będącym rozszerzonym sprzężonym układem wiązań podwójnych skutkuje powstaniem pozycji nasyconej, pozycję tą wskazuje się symbolem wskazanego atomu wodoru (patrz P-14.7; P-58.2).

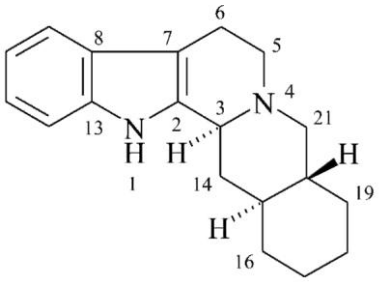
Przykłady:



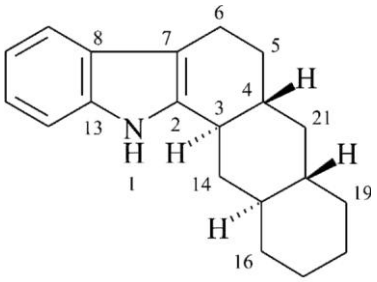
morfinan
(podstawowa struktura macierzysta)



2*H*-1-oksamorfinan



johimban
(podstawowa struktura macierzysta)



(4β*H*)-4-karbajohimban

P-101.5 ADDYCJA PIERŚCIENI I UKŁADÓW PIERŚCIENIOWYCH

Do struktur macierzystych mogą zostać zostać przyłączone trzy typy pierścieni lub układów pierścieni

P.101.5.1 Włączanie pierścieni lub układów pierścieni mancude z zastosowaniem nomenklatury skondensowanej

P.101.5.2 Włączanie pierścieni lub układów pierścieni z zastosowaniem nomenklatury mostkowych pierścieni skondensowanych

P.101.5.3 Włączanie pierścieni lub układów pierścieni z zastosowaniem nomenklatury spiranowej

Stosuje się tu, w pewnych przypadkach dostosowane do struktur macierzystych, opisane w rozdziałach od P-1 do P-8 metody wykorzystywane do tworzenia nazw systematycznych.

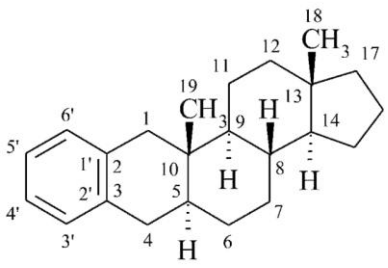
P.101.5.1 Włączanie pierścieni lub układów pierścieni mancude z zastosowaniem nomenklatury układów skondensowanych.

Podstawowa struktura macierzysta jako składnik jest stosowana w nomenklaturze skondensowanej w jej normalnym stopniu uwodornienia. W związku z tym w miejscu skondensowania nie wskazuje się wiązania podwójnego, ponieważ drugi składnik zawiera maksymalną liczbę nieskumulowanych wiązań podwójnych. Ponadto, w przeciwieństwie do reguł opisanych w P-25, jako główną wybiera się zawsze podstawową strukturę macierzystą, a dołączony składnik musi stanowić pierścień lub układ pierścieni zawierający maksymalną liczbę nieskumulowanych wiązań podwójnych.

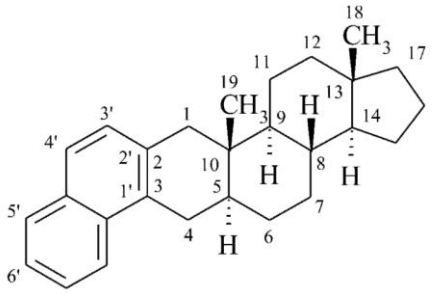
P.101.5.1.1 Zgodnie z regułami określonymi w P-2, karbocykliczny lub heterocykliczny pierścień lub układ pierścieni traktowany jako macierzysty wodorek zawierający maksymalną liczbę nieskumulowanych wiązań podwójnych, połączony ze strukturą macierzystą, wskazuje się jego przedrostkiem skondensowania (patrz P-25) poprzedzającym nazwę podstawowej struktury macierzystej. Atomy szkieletu struktury macierzystej w miejscu skondensowania określa się zwykłymi (nieprimowanymi) lokantami, a nie pisanymi kursywą literami ‘*a*’, ‘*b*’ etc., uczestniczące w skondensowaniu atomy szkieletu składnika mancude oznacza się primowanymi lokantami. Miejsce skondensowania wskazuje się deskryptorem skondensowania zawierającym dwa zestawy lokantów; najpierw wymienia się zestaw lokantów dołączonego składnika, drugi zestaw odnosi się do głównego skladnika podstawowej struktury macierzystej; oba zestawy lokantów, oddzielone dwukropkiem, ujmuje się w kwadratowy nawias i umieszcza między nazwami obu składników. Jeżeli istnieje możliwość wyboru, lokanty dołączonego składnika mancude są możliwe najniższe i wymieniane zgodnie z kierunkiem numerowania struktury macierzystej.

> W anglojęzycznej literaturze wprowadzono zmianę w stosunku do wcześniejszych zaleceń. Nie pomija się końcowych samogłosek ‘o’ lub ‘a’ w nazwie przedrostka, jeżeli następująca po nich litera jest samogłoską, jak określono w zasadach zwykłej nomenklatury skondensowanej w P-25.3.1.3.
> Dla polskiej nomenklatury ta zmiana nie ma znaczenia, ponieważ stosowane jest eufoniczne ‘o’ i końcowa litera ‘a’ nie jest opuszczana.

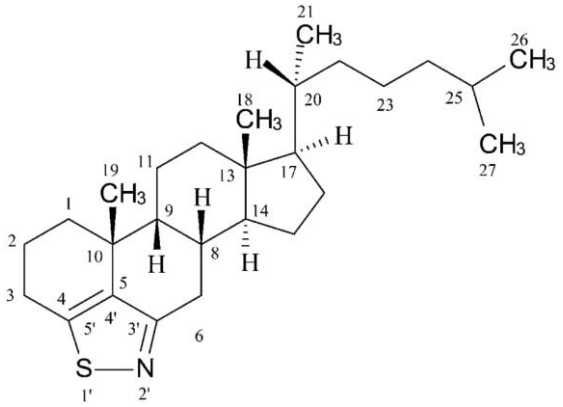
Przykłady:



benzo[2,3]-5α-androstan
(lokanty 1′,2′ pomija się)



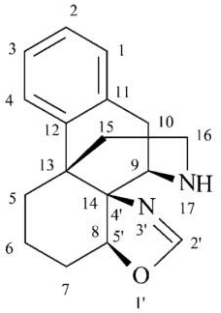
nafto[2′,1′:2,3]-5α-androstan



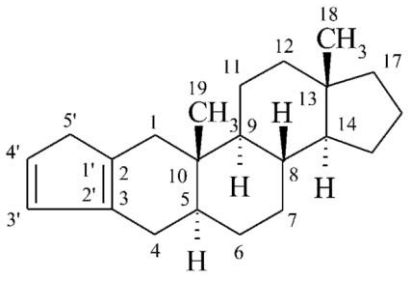
[1,2]tiazolo[5′,4′,3′:4,5,6]cholestan
(nie izotiazolo[5′,4′,3:4,5,6]cholestan; nazwa izotiazol nie jest już zalecana jako nazwa dołączonego składnika, patrz P-25.3.2.1.2)

P.101.5.1.2 **P**rzyłączony składnik skondensowany ze strukturą macierzystą jest związkiem mancude. Obecne w takim fragmencie pozycje nasycone, również w miejscach skondensowania, w których występuje przynajmniej jeden atom wodoru, określa się wskazanym atomem wodoru. Określa się je również za pomocą deskryptorów składających się kolejno z lokantu, deskryptora konfiguracji ‘α’ lub ‘β’ i na końcu symbolem wskazanego atomu wodoru (patrz P-14.7), umieszczonym w nawiasach przed nazwą związku, podobnie jak to jest w przypadku stereodeskryptorów. Do określenia pozycji wskazanego atomu wodoru stosuje się lokanty przyłączonego składnika, chyba że istnieje wybór między nieprimowanymi i primowanymi lokantami, wtedy należy stosować lokanty (nieprimowane) stereomacierzystego wodorku.

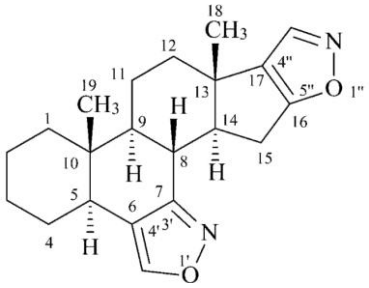
Przykłady:



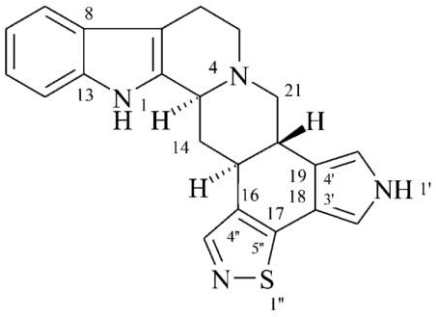
(8α*H*)-[1,3]oksazolo[5′,4′:8,14)morfinan
[nie 8α*H*-oksazolo[5′,4′:8,14]morfinan; nazwa oksazol bez lokantów heteroatomów nie jest już zalecana jako składnik skondensowania; aby nazwa była kompletna konieczny jest ‘wskazany atom wodoru’ określony stereodeskryptorem (8α*H*)]



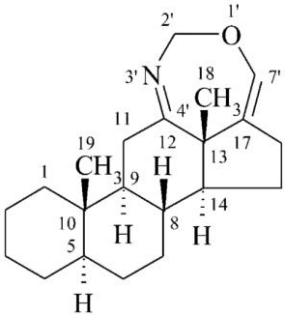
5′*H*-cyklopenta[2,3]-5α-androstan



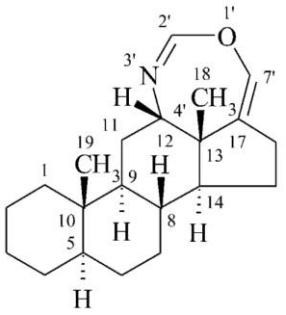
bis[1,2]oksazolo[4′,3′:6,7;5′′,4′′:16,17]-5α-androstan



1′*H*-pirolo[3′,4′:18,19][1,2]tiazolo[4′′,5′′:16,17]johimban



2′*H*-[1,3]oksazepino[4′,5′,6′:12,13,17]-5α-androstan

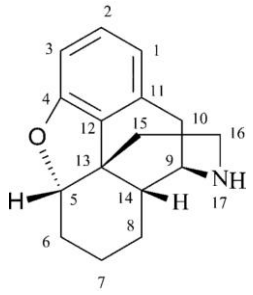


(12β*H*)-12*H*-[1,3]oksazepino[4′,5′,6′:12,13,17]-5α-androstan

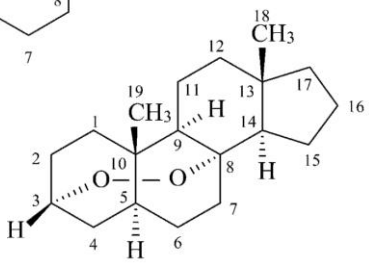
P.101.5.2 Pierścienie lub układy pierścieni włączonee do nomenklatury mostkowych pierścieni skondensowanych

Atomowe mostki dołączone do podstawowej struktury macierzystej można opisywać metodami stosowanymi w nomenklaturze skondensowanej mostkowych układów skondensowanych pierścieni. Nazwy mostków określono w P-25.4. Metoda ta jest często stosowana dla mostków zawierających heteroatomy.W istocie do opisu niektórych typów pierścieni heterocyklicznych skondensowanych z podstawową strukturą macierzystą metoda ta jest często bardziej użyteczna niż zasady nomenklatury skondensowanej opisane w P-101.5.1, na przykład ‘epoksy’ do wskazania mostka a nie ‘oksireno’ wskazujące skondensowany pierścień jako przyłączony składnik. Stosowanie atomowych mostków jest korzystniejsze niż nomenklatura skondensowana w odniesieniu do układów, w których połączone są dwa nie sąsiadujące atomy w podstawowej strukturze macierzystej [epoksydy i tioepoksydy są wyjątkami, ponieważ mogą być nazywane podstawnikowo (patrz P-63.5)]. Przedrostki wskazujące mostki są nierozłączne; wymienia się je w nazwie, przed przedrostkami określającymi modyfikacje szkieletu, a poprzedza odpowiednimi lokantami.

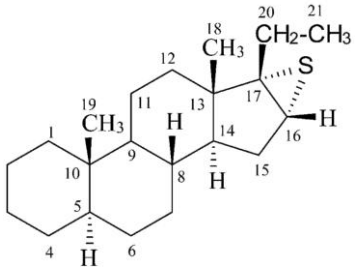
Przykłady:



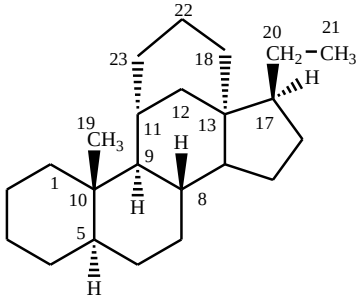
4,5α-epoksymorfinan
(5β*H*)-5,13-dihydrofuro[2′,3′,4′,5′:4,12,13,5]morfinan



3α,8-epidioksy-5α,8α-androstan

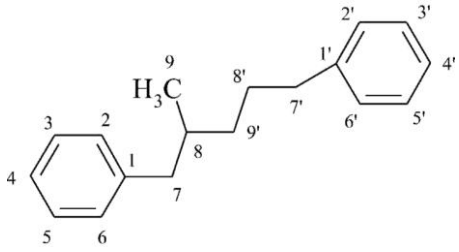


(16β*H*)-tiireno[2′,3′:16,17]-5α-pregnan (nazwa skondensowana)
16α,17-epitio-5α-pregnan

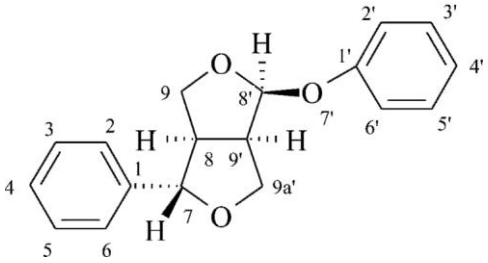


11α,18-etano-5α,13α-pregnan
11α,13-propano-18-nor-5α,13α-pregnan
11α,18-cyklo-12a,12b-dihomo-5α-pregnan
11α,18b-cyklo-18a,18b-dihomo-5α,13α-pregnan

Wyjaśnienie: Inwersja konfiguracji na atomie C-13 nie jest liczona jako operacja ponieważ nie modyfikuje szkieletu cząsteczki.



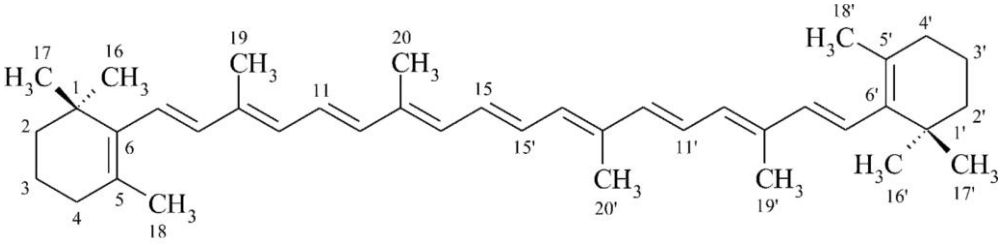
8,9′-neolignan
(1,1′-(2-metylopentano-1,5-diylo)dibenzen



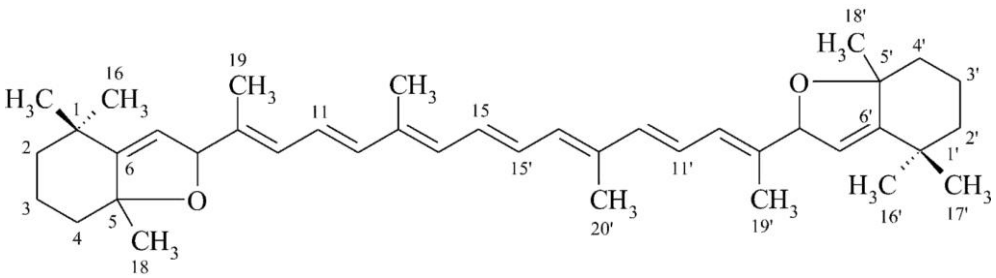
(7α,8α,8′β,9′α)-7,9a′:8′,9-diepoksy-7-oksa-9a′-homo-8,9′-neolignan
(1*S*,3a*R*,4*S*,6a*R*)-1-fenoksy-4-fenylotetrahydro-1*H*,3*H*-furo[3,4-c]furan

W przeciwieństwie do zaleceń nomenklatury systematycznej związków organicznych, w nomenklaturze karotenoidów (patrz lit. 40), mostek o nazwie ‘epoksy’ uważa się za rozłączny a przedrostki hydro/dehydro za nierozłączne. Nazwa poniższego β,β-karotenu zawierającego mostek jest zgodna z zasadami nomenklatury karotenoidów (lit. 39, Reguła Karotenoidowa 7.3) ale w sprzeczności z regułą 14.4.4.

Przykłady:



β,β-karoten
(podstawowa struktura macierzysta)



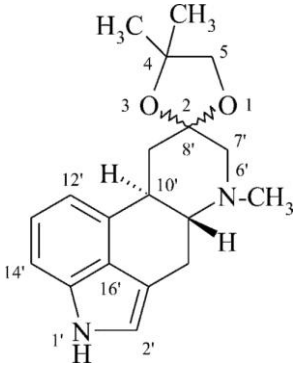
5,8:5′,8′-diepoksy-5,8,5′,8′-tetrahydro-β,β-karoten

(patrz podrozdział P-14.3.1 dotyczący użycia lokantów nieprimowanych i primowanych)

P.101.5.3 Pierścieni lub układy pierścieni włączone do nomenklatury spiranowej

Związki spiranowe nazywa się tak jak to zalecono w P-24.5 dla związków monospiranowych zawierających przynajmniej jeden składnik policykliczny.

Przykład:



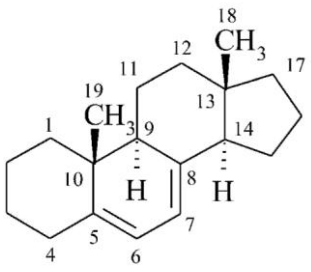
(2ξ)-4,4,6′-trimetylospiro[1,3-dioksolano-2,8′-ergolina]

P-101.6 MODYFIKACJA STOPNIA UWODORNIENIA STRUKTUR MACIERZYSTYCH

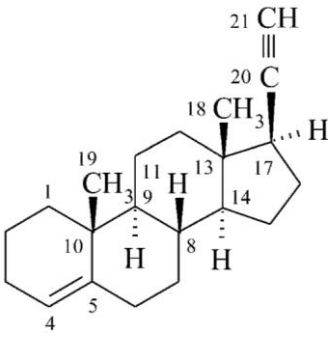
W stosunku do struktur macierzystych stosuje się ogólne zasady i reguły dotyczące zmiany stopnia uwodornienia macierzystych wodorków, określone w P-31. Końcówki ‘en’ i ‘yn’ (patrz P-31.1) oraz przedrostki ‘hydro’(patrz P-31.2) i ‘dehydro’(patrz P-31.3) stosuje się w zależności od tego czy wymagana jest operacja addycji czy subtrakcji. Nie ma limitu wprowadzania wiązań podwójnych w macierzystych wodorkach; przedrostki ‘hydro/dehydro’ można stosować w dowolnej wymaganej liczbie pod warunkiem, że nie tworzy się struktura mancude.

P-101.6.1 Nienasycenie w związku, którego macierzysta struktura jest w pełni nasycona lub w części struktury macierzystej, która jest w pełni nasycona i której nazwa kończy się na ‘an’, lub ‘anina’ wskazuje się zamianą końcówki ‘an’ na ‘en’ lub ‘yn’ i dodanie liczbowego przedrostka zwielokrotniającego, jak to opisano w P-31.1.1.2. Lokanty umieszcza się bezpośrednio przed częścią nazwy, której one dotyczą.

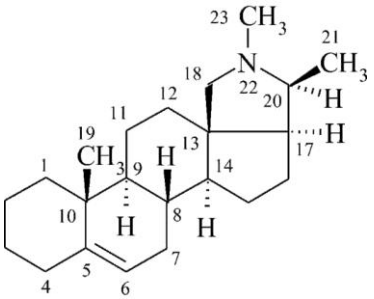
Przykłady:



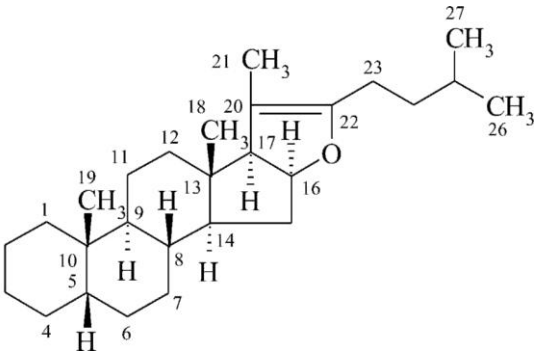
androsta-5,7-dien



pregn-4-en-20-yn



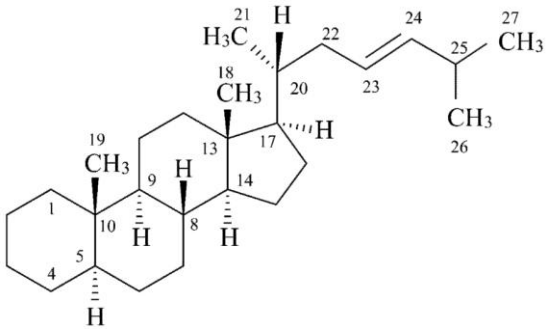
kon-5-enina



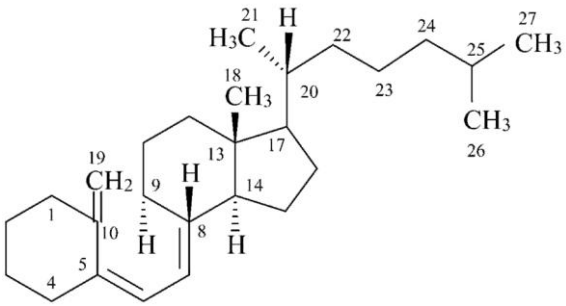
5β-furost-20(22)-en

P-101.6.2 Deskryptory '*E*' lub '*Z*' poprzedzone odpowiednimi lokantami stosuje się do określenia zmienionych lub dodatkowych konfiguracji wiązań podwójnych. Stereodeskryptory '*cis*' i '*trans*' stosuje się w nomenklaturze karotenoidów (lit. 40) i retinoidów (lit. 49).

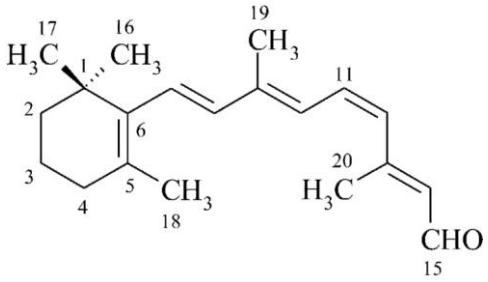
Przykłady:



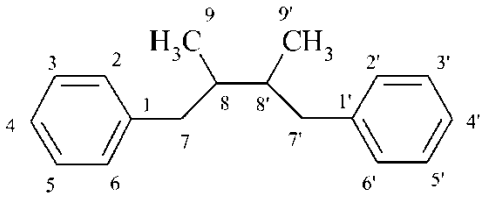
(23*E*)-5α-cholest-23-en



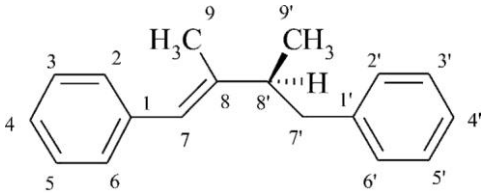
(5*Z*,7*E*)-9,10-sekocholesta-5,7,10(19)-trien



11-*cis*-retinal



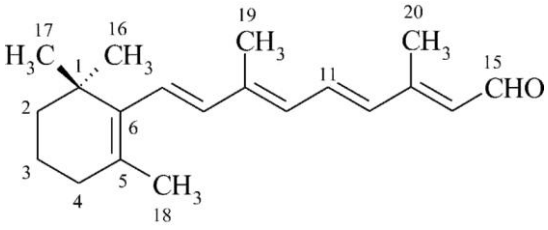
lignan
(podstawowa struktura macierzysta)



(7*E*,8′*S*)-lign-7-en
1-[(1*E*,3*S*)-2,3-dimetylo-4-fenylobut-1-en-1-ylo]benzen
1,1′-[(1*E*,3*S*)-(2,3-dimetylobutan-1,4-diylo)]dibenzen

P-101.6.3 Przedrostek ‘*all*’ zapisany przed stereodeskryptorem wskazuje, że wszystkie konfiguracje są identyczne. Przedrostek ten stosuje się tylko w nomenklaturze produktów naturalnych, na przykład określenie ‘*all-trans*’ oznacza, że wszystkie wiązania podwójne w cząsteczce retinalu mają konfigurację ‘*trans*’.

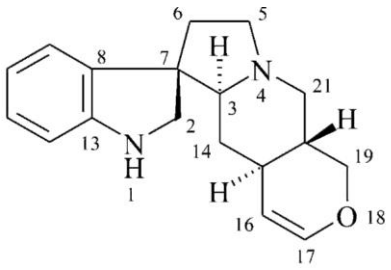
Przykład:



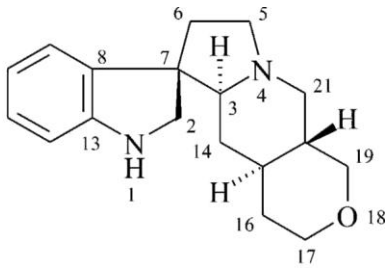
(*all-trans*)-retinal

P-101.6.4 Nasycenie wiązań podwójnych w strukturze macierzystej, której nazwa sugeruje obecność izolowanych wiązań podwójnych i/lub sprzężonego układu wiązań podwójnych, wskazuje się przedrostkiem ‘hydro’ poprzedzonym lokantami wskazującymi miejsca nasycenia. Przedrostek ‘hydro’ jest rozłączny i zawsze wymieniany bezpośrednio przed nazwą podstawowej struktury macierzystej (patrz P-31.2).

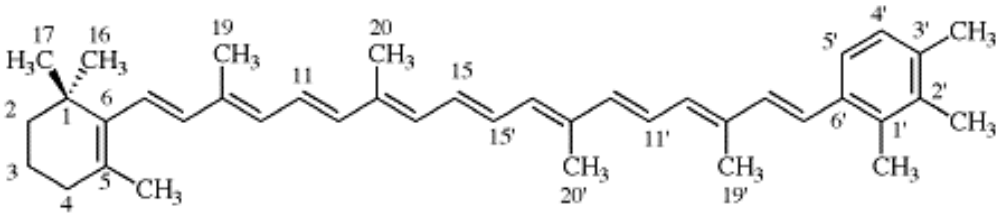
Przykłady:



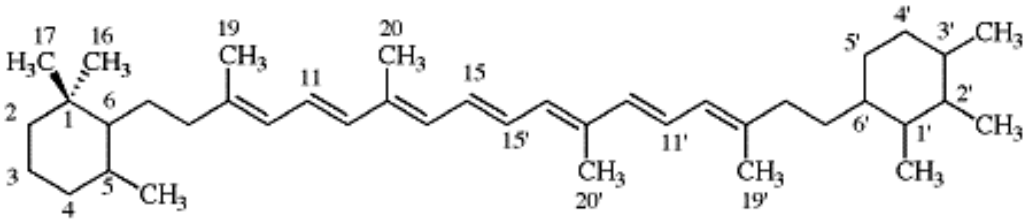
formozanan
(podstawowa struktura macierzysta)



16,17-dihydroformozanan



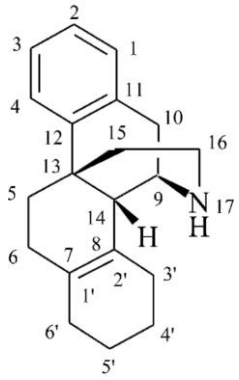
β,χ-karoten



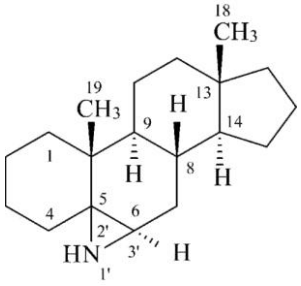
5,6,7,8,1′,2′,3′,4′,5′,6′,7′,8′-dodekahydro-β,χ-karoten
(patrz P-14.3.1 dotyczący użycia lokantów nieprimowanych i primowanych)

P-101.6.5 Nasycone lub częściowo nasycone pierścienie karbocykliczne lub heterocykliczne skondensowane z macierzystą strukturą nazywa się stosując przedrostki ‘hydro’. Jeżeli jest możliwość wyboru pomiędzy nieprimowanymi i primowanymi , stosuje się lokanty nieprimowane

Przykłady:



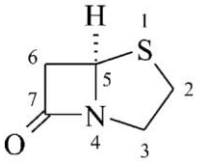
3′,4′,5′,6'-tetrahydrobenzo[7,8]morfinan



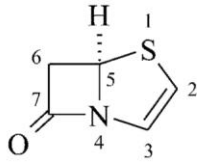
(6α*H*)-1′,6-dihydroazyryno[2′,3′:5,6]-5β-androstan
[znaczenie symbolu (6α*H*), patrz P-101.5.1.2]

P-101.6.6 Dodatkowe miejsce nienasycenia w stosunku do obecnych już w strukturze macierzystej, której nazwa nie kończy się na ‘an’ lub ‘anina’, zmiana wiązania podwójnego na potrójne i wprowadzenie dodatkowego podwójnego wiązania powiązane z przegrupowaniem wiązania już istniejącego, określa się przedrostkiem ‘dehydro’ wraz z przedrostkiem określającym liczbę usuniętych atomów wodoru wraz z odpowiednimi lokantami. Przedrostek ‘dehydro’ jest rozłączny i podawany zawsze przed nazwą podstawowej struktury macierzystej, ewentualnie po innych rozłącznych przedrostkach wymienionych w kolejności alfabetycznej.

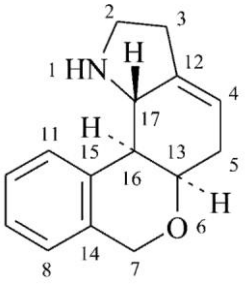
Przykłady:



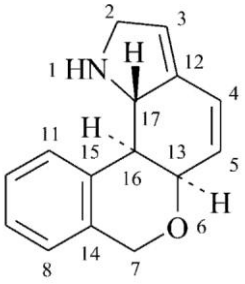
penam
(podstawowa struktura macierzysta)
(należy zwrócić uwagę na nową numerację)



2,3-didehydropenam

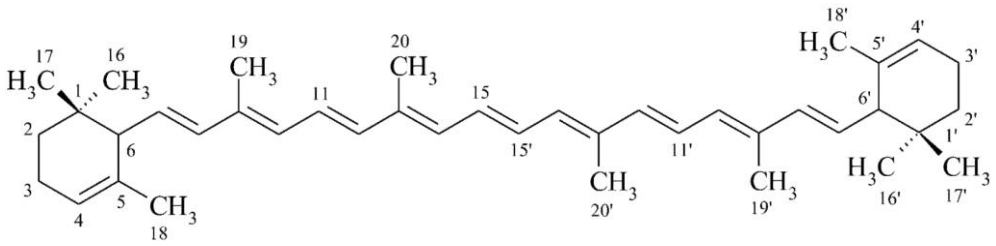


likorenan

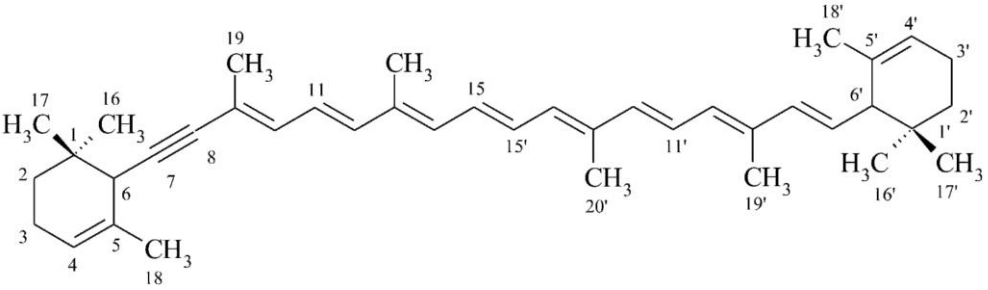


3,5-didehydrolikorenan

(podstawowa struktura macierzysta)

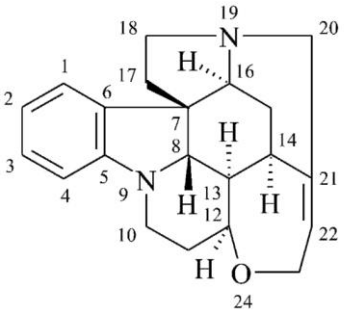


ε,ε –karoten
(podstawowa struktura macierzysta)

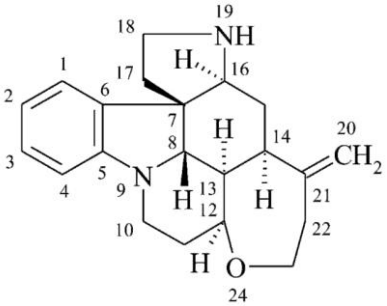


7,8-didehydro-ε,ε –karoten
(patrz P-14.3.1 dotyczący użycia nieprimowanych i primowanych lokantów)

P-101.6.7 Przegrupowanie wiązań podwójnych można wskazać stosując kombinację przedrostków ‘hydro’ i ‘dehydro’. Zgodnie z porządkiem alfabetycznym, przedrostek ‘dehydro’ wymienia się przed przedrostkiem ‘hydro’.
Przykład:



strychnidyna
(podstawowa struktura macierzysta)



20,21-didehydro-21,22-dihydro-19,20-sekostrychnidyna

P-101.7 POCHODNE STRUKTUR MACIERZY STYCH

Pochodne struktur macierzystych nazywa się zgodnie z zasadami, regułami i konwencjami opisanymi w rozdziałach P-1 do P-9.

P-101.7.1 Przyrostki i przedrostki nomenklatury związków organicznych stosuje się w określony sposób do nazywania atomów i grup uznawanych za podstawiające atomy wodoru struktur

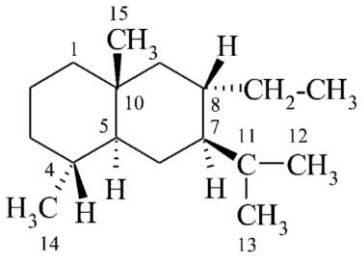
macierzystych. Stereodeskryptory α, β, i ξ stosowane w celu opisania konfiguracji umieszcza się przed przedrostkiem lub przyrostkiem, poprzedzając odpowiednim lokantem. Tak utworzone nazwy podstawnikowe preferuje się względem nazw klasowo- funkcyjnych, z wyjątkiem niektórych cyklicznych grup funkcyjnych.

Podstawienie pierścieni oraz fragmentów końcowych rozpatruje się niezależnie.

P-101.7.1.1 Podstawienie grupami alkilowymi

P-101.7.1.1.1 Grupy organylowe takie jak grupy arylowe i alkilowe wprowadza się zgodnie z nomenklatura podstawnikową.

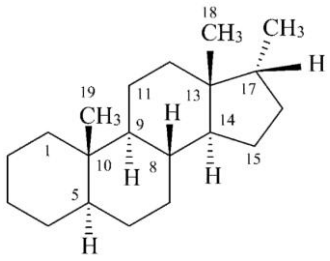
Przykład:



8α-etylo-5α-eudesman

P-101.7.1.1.2 Stosując procedurę podstawnikową wprowadza się do androstanu grupę metylową w pozycję 17α; alternatywna metoda polegająca na subtrakcji grupy metylenowej z pregnanu z zastosowaniem nierozłącznego przedrostka ‘nor’ nie jest zalecana (patrz P-101-3.7.1).

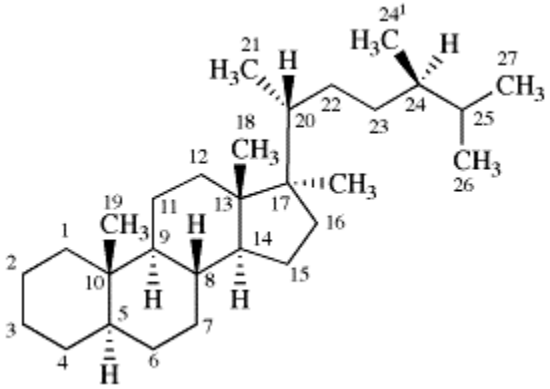
Przykład:



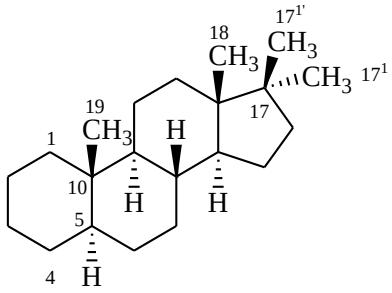
17α-metylo-5α-androstan
(nie 21-nor-5α-pregnan)

P-101.7.1.1.3 Reguła 3S-2.7 (lit. 16) opisuje metodologię nazywania steroidów mających łańcuch boczny będący częścią macierzystego układu karbocyklicznego i podstawnik alkilowy przy C-17. Reguła 3S-2.7 podaje również metodologię nazywania steroidów z dwoma podstawnikami alkilowymi w pozycji C-17. Metodologia ta ma zastosowanie dla każdej podstawowej struktury macierzystej opisanej w P-101. Lokanty z numerem w indeksie górnym przeznaczone są do identyfikacji atomów np.: w przypisaniu sygnałów ^{13}C-NMR, a nie jako lokanty do wskazania dalszego podstawienia.

Przykłady:



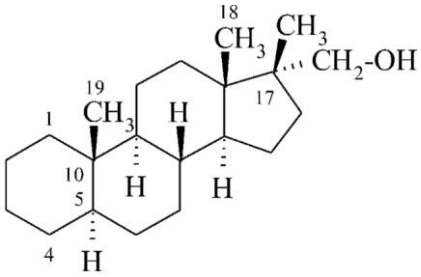
17-metylo-5α-kampestan
(dodatkowa grupa metylowa w pozycji C-17 otrzymuje numer 17^1;
pozostałe atomy są numerowane jak zwykle)



17,17-dimetylo-5α-androstan
(obie dodatkowe grupy metylowe otrzymują numer 17^1,z tym, że grupa β-metylowa jest primowana)

P-101.7.1.1.4 Kiedy grupa charakterystyczna wymieniana w przyrostku, występuje w grupie alkilowej dodanej do podstawowej struktury macierzystej, stosuje się zasady, reguły i konwencje nomenklatury podstawnikowej.

Przykład:

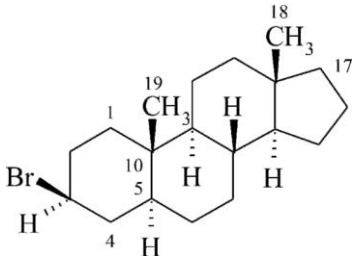


(17β-metylo-5α-androstan-17α-ylo)metanol
[nie (21-nor-5α-pregnan-17α-ylo)metanol]

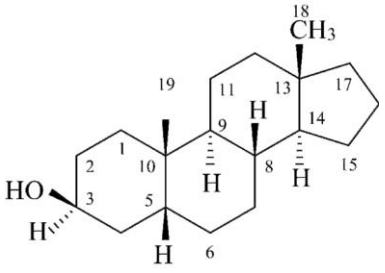
P-101.7.1.2 Podstawienie w pierścieniu

Przyrostki używa się zgodnie z porządkiem starszeństwa przyrostków, uwzględniając cykliczny charakter macierzystego wodorku. Przedrostki rozłączne wymienia się w porządku alfanumerycznym. Końcówki ‘en’ i ‘yn’ wskazuje się w normalny sposób. Przedrostki ‘hydro-dehydro’ są rozłączne, a wymienia się je jako ostatnie wśród przedrostków rozłącznych.

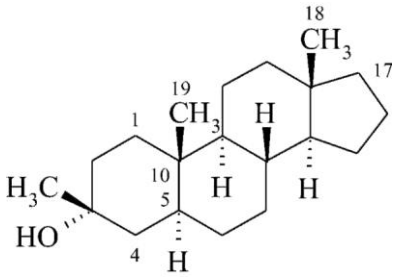
Przykłady:



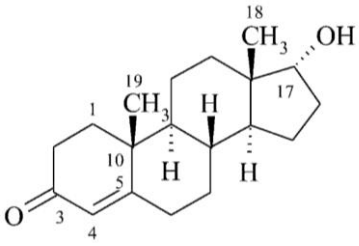
3β-bromo-5α-androstan
bromek 5α-androstan-3β-ylu



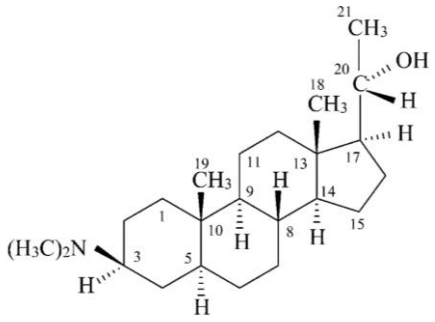
5β-androstan-3β-ol



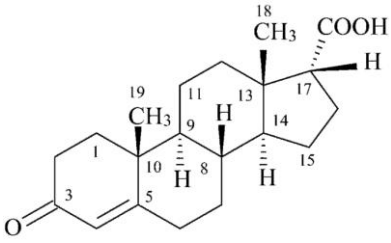
3β-metylo-5α-androstan-3α-ol



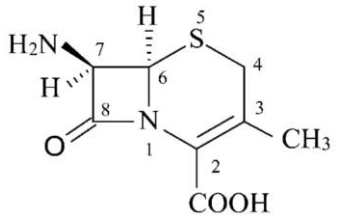
17α-hydroksyandrost-4-en-3-on



(20*S*)-3β-dimetylotyloamino)-5α-pregnan-20-ol



kwas 3-oksoandrost-4-eno-17α-karboksylowy
[nie kwas 21-nor-5α-pregnan-20-owy; prawidłowa nazwa zawiera najmniejszą liczbę operacji (patrz P-101.3.7.1)]

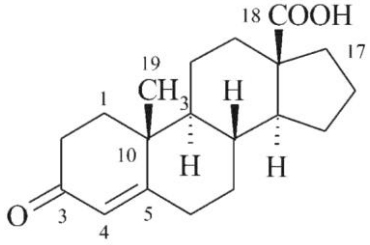


kwas (6*R*,7*R*)-7-amino-3-metylo-8-okso-5-tia-1-azabicyklo[4.2.0]okt-2-eno-2-karboksylowy
kwas 7β-amino-3-metylo-2,3-didehydrocefamo-2-karboksylowy
[należy zwrócić uwagę na nową numerację dla cefamu; jest inna niż podawana w odnośniku literaturowym (lit. 9)]

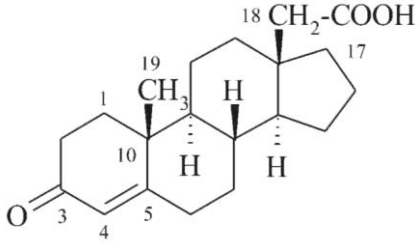
P-101.7.1.3 Podstawienie końcowych segmentów

Zaleca się stosowanie przedrostków i przyrostków do nazywania grup charakterystycznych podstawiających końcowe segmenty, nawet gdy grupa charakterystyczna zawiera atom węgla. Dopuszczalne jest wydłużanie końcowych segmentów o dwie grupy metylenowe i jest ono wskazywane przedrostkiem ‘dihomo’. Dalsze przedłużenie jest również możliwe, ale z użyciem nazwy grupy alkilowej, jako wyjątek od reguły starszeństwa najdłuższego łańcucha.

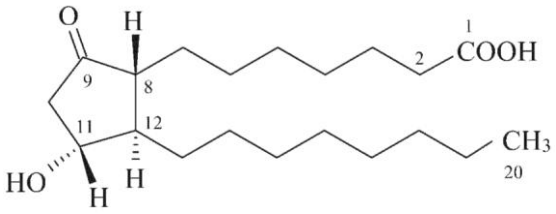
Przykłady:



kwas 3-oksoandrost-4-en-18-owy



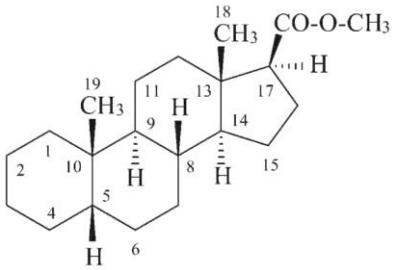
kwas 3-oksoandrost-4-eno-18-karboksylowy



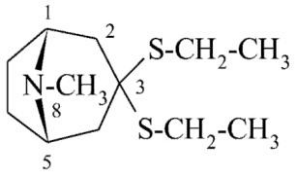
kwas 11α-hydroksy-9-oksoprostan-1-owy

P-101.7.2 Modyfikacje głównych grup funkcyjnych, takich jak estry (patrz P-65.6.3.2), acetale (patrz P-66.6.5), itp. nazywa się zwykłymi metodami opisanymi w P-6. Cykliczne związki z tej grupy korzystniej jest nazywać laktonami, cyklicznymi acetalami, itp. niż układami skondensowanymi lub spiro, nawet jeśli te nazwy są nazwami klas funkyjnych (patrz P-101.7.4).

Przykłady:



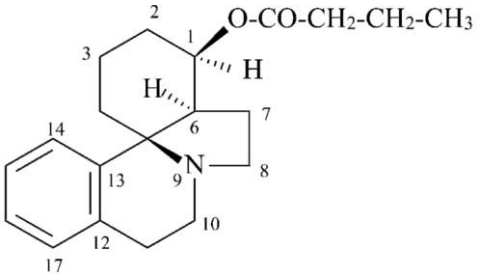
5β-androstano-17β-karboksylan metylu



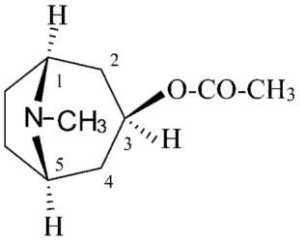
(1*R*,5*S*)-3,3-bis(etylosulfanylo)-8-metylo-8-azabicyklo[3.2.1.]oktan
3,3-bis(etylosulfanylo)tropan
ditioketal dietylowy tropan-3-onu

P-101.7.3 Nazwy podstawników pochodzących od struktur macierzystych tworzy się ogólnym sposobem opisanym w P-29, dodając przyrostki 'yl', 'ylideno' lub 'ylidyno' do odpowiedniej nazwy struktury macierzystej.

Przykłady:



butanian erytrynan-1β-ylu

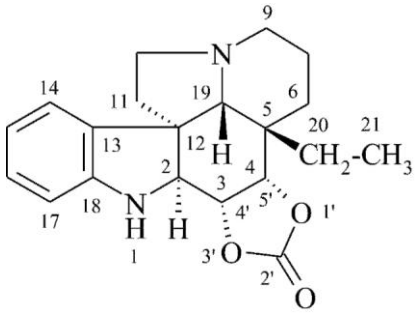


octan tropan-3β-ylu
octan (1*R*,3*s*,5*S*)-8-metylo-8-azabicyklo[3.2.1]oktan-3-ylu (patrz P-93.5.2.2.1)

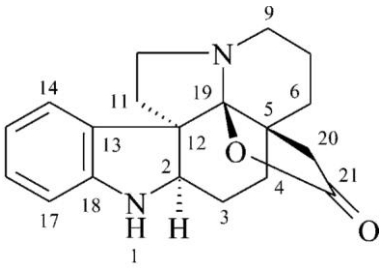
P-101.7.4 Addycja pierścieni jako grup funkcyjnych

Pierścienie jako grupy funkyjne najkorzystniej nazywać stosując standardowy sposób tworzenia nazw systematycznych. Tworząc nazwy cyklicznych estrów i laktonów stosuje się ogólne metody nazywania estrów (patrz P-65.6.3.5.1). Acetale nazywa się stosując raczej reguły nomenklatury klasowo-funkcyjnej (patrz P-66.6.5) niż nomenklatury skondensowanej opisanej w P-101.5. Gdy możliwy jest wybór, preferowana jest nazwa skondensowana.

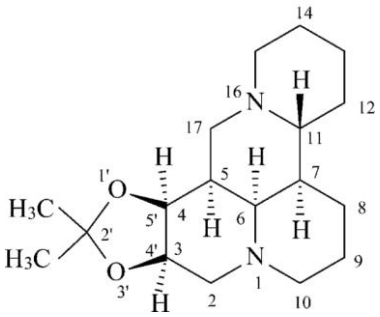
Przykłady:



(3β*H*,4β*H*)-3,4-dihydro[1′,3′]dioksolo[4′,5′:3,4]aspidospermidyn-2′-on
karbonian aspidospermidyno-3α,4α-diylu



19,21-epoksyaspidospermidyn-21-on
21-noraspidospermidyno-20,19-karbolakton (patrz P-65.6.3.5.1)
19-hydroksyaspidospermidyno-21,19-lakton

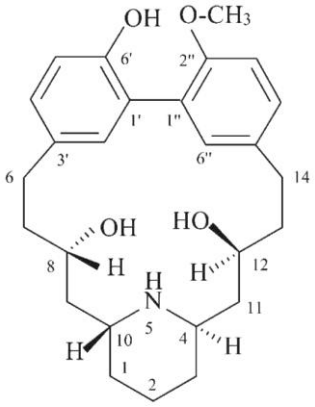


(3α*H*,4α*H*)-2′,2′-dimetylo-3,4-dihydro-[1′,3′]-dioksolo[4′,5′:3,4]matrydyna
acetal matrydyno-3β,4β-diylowy propan-2-onu (patrz P-66.6.5)
acetal matrydyno-3β,4β-diylowy acetonu

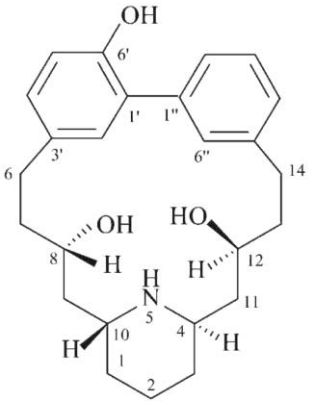
P-101.7.5 Przedrostek ‘de’ (nie ‘des’), poprzedzający nazwę grupy albo atomu (innego niż wodór) oznacza usunięcie takiej grupy lub atomu i, jeśli to konieczne, wstawienie w jego miejsce

atomu wodoru. Przedrostek ‘de’ jest obecnie stosowany w nomenklaturze węglowodanów (patrz P-102.5.3) do wskazania usunięcia atomu tlenu z grupy –OH i dołączenie w to miejsce atomu wodoru.

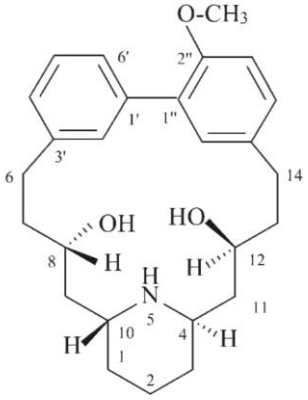
Przykłady:



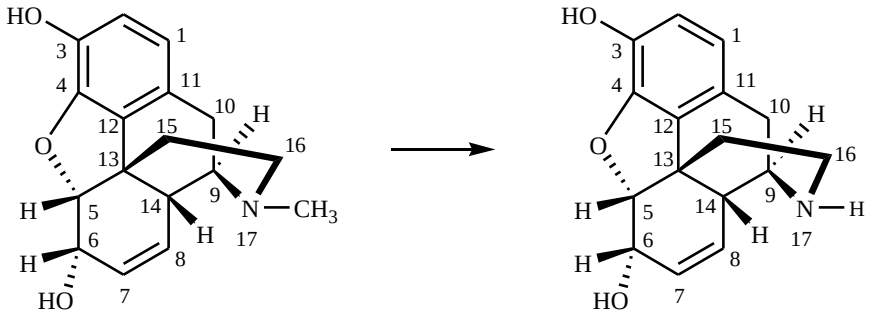
litranidyna
(podstawowa struktura macierzysta)



2′′-demetoksylitranidyna



6′-deoksylitranidyna



I **II**

morfina demetylomorfina

I (5β*H*)-17-metylo-7,8-didehydrofuro[2′,3′,4′,5′:4,12,13,5]morfinano-3,6α-diol
II (5β*H*)-7,8-didehydrofuro[2′,3′,4′,5′:4,12,13,5]morfinano-3,6α-diol

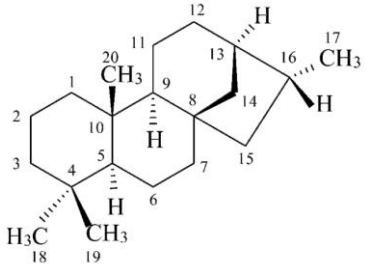
P-101.8 DALSZE ASPEKTY OKREŚLANA KONFIGURACJI

Oprócz określenia absolutnej konfiguracji podstawowych i modyfikowanych struktur macierzystych przy użyciu stereodeskryptorów : ‘α’, ‘β’, ‘ξ’, ‘*R*’ i ‘*S*’, należy opisać wiele innych właściwości stereochemicznych, stosując do tego celu zasady, reguły i konwencje opisane w P-9.

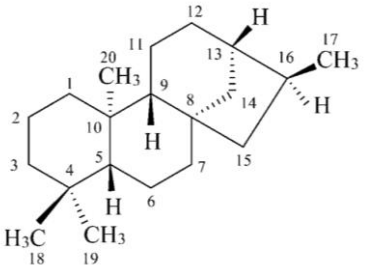
P-101.8.1 Inwersja konfiguracji

Inwersję konfiguracji wszystkich centrów chiralności wskazuje się pisanym kursywą przedrostkiem ‘*ent*’ (skrócona forma ‘*enantio*’) umieszczonym na początku pełnej nazwy związku. Przedrostek ten oznacza inwersję wszystkich centrów chiralności (włączając centra, przy których znajdują się nazwane podstawniki), zarówno tych wymienianych oddzielnie jak i zawartych w nazwie związku. Poniżej przedstawiono poprawne struktury i nazwy dla kauranu i ‘*ent*’-kauranu; te oznaczenia są odwrotnością używanych przez Chemical Abstracts (patrz lit. 21).

Przykład:



kauran



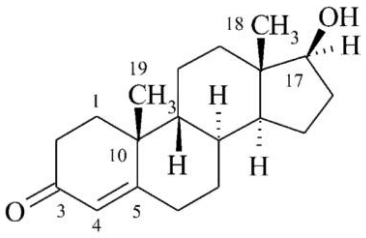
ent-kauran

P-101.8.2 Racematy

Racematy oznacza się w nazwie pisanym kursywą przedrostkiem ‘*rac*’(skrót od *racemo*) na poczatku pełnej nazwy związku, łącznie z przedrostkiem ‘*epi*’, jeśli taki występuje. W przypadku związku racemicznego struktura rysowanego enancjomeru powinna pokazywać jak najmniejszą liczbę centrów chiralności o α-konfiguracji. Może to się różnić od zwykłej praktyki, która polega na rysowaniu struktury enancjomerycznej mającej taką samą konfigurację absolutną jak naturalnie występująca substancja.

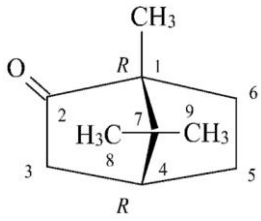
P-101.8.3 Konfiguracja względna

Jeżeli jest znana względna, a nie absolutna, relacja konfiguracji centrów chiralności wskazuje się ją symbolem ‘*rel*’ wspólnie z *R* lub *S* (preferowane względem *‘R**’* i/lub *'S***’*) według reguły P-93.5.1.2. Enancjomery o znanej względnej ale nie absolutnej konfiguracji można odróżniać za pomocą stereodeskryptora (+)-*rel* lub (-)-*rel*, gdzie plus i minus oznaczają kierunek skręcania płaszczyzny światła spolaryzowanego (linia D światła sodowego). Stąd, prawoskrętną formę poniższej struktury powinno się nazwać: (+)-*rel*-17β-hydroksy-8α,9β-androst-4-en-3-on.

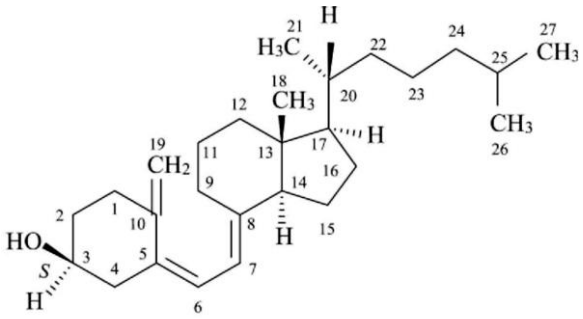


P-101.8.4 Stereodeskryptory '*R*' i '*S*' stosuje się do opisania absolutnej konfiguracji centrów stereogenicznych związku, którego struktura macierzyta jest achiralna, na przykład bornanu. Stosuje się je również zamiast przedrostków 'α', 'β', 'ξ', kiedy pierścień jest otwarty tworząc dwie chiralne części, z których jedna może się obracać, jak w przypadku witaminy D.

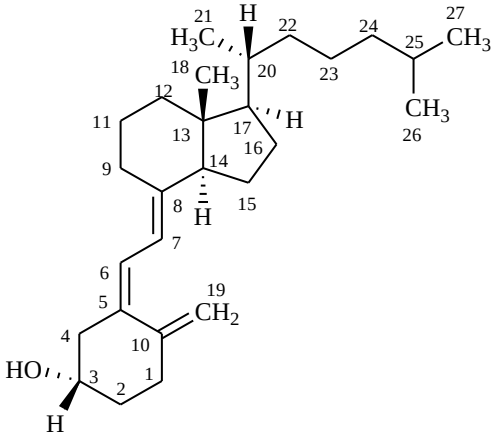
Przykłady:



(1*R*,4*R*)-bornan-2-on
(+)-kamfora
(1*R*,4*R*)-1,7,7-trimetylobicyklo[2.2.1]heptan-2-on



(I)



(II)

(I) jest odpowiednikiem **(II)**

(3*S*,3*Z*,7*E*)-9,10-sekocholestan-5,7-10(19)-trien-3-ol
[struktury **(I)** i **(II)** są dwoma konformacjami tej samej pochodnej 3-hydroksy]

P-102 NOMENKLATURA WĘGLOWODANÓW

P-102.0 WPROWADZENIE

Nomenklatura węglowodanów oparta jest na nazwach struktur macierzystych monosacharydów mających zachowane nazwy. Ich struktury i nazwy można modyfikować w celu wskazania obecnych w ich strukturze grup charakterystycznych, to jest aldehydowej, karboksylowej, alkoholowej. Monosacharydy mogą również łączyć się tworząc di-, tri- i oligosacharydy.

Nomenklatura węglowodanów została w ostatnim czasie poprawiona [lit. 26]. Ten rozdział opisuje podstawowe zasady tej szczególnego typu nomenklatury, a zwłaszcza rozwinięty system symboli i stereodeskryptorów stosowanych w celu określenia konfiguracji wielu diastereoizomerów oraz enancjomerów.

P.102.1 Definicje
P-102.2 Macierzyste monosacharydy
P-102.3 Symbolika konfiguracyjna
P-102.4 Wybór struktury macierzystej
P-102.5 Monosacharydy: aldozy i ketozy; deoksy i aminocukry
P-102.6 Monosacharydy i ich pochodne jako podstawniki
P-102.7 Disacharydy i oligosacharydy

P.102.1 DEFINICJE

P.102.1.1 Węglowodany
P.102.1.2 Monosacharydy
P.102.1.3 Oligosacharydy
P.102.1.4 Polisacharydy

P.102.1.1 Węglowodany

Ogólny termin ‘ węglowodany’ obejmuje monosacharydy, oligosacharydy i polisacharydy, a także związki pochodzące z redukcji grupy karbonylowej w monosacharydach (alditole), z utlenienia jednej lub więcej grup końcowych do kwasów karboksylowych lub z wymiany jednej lub więcej grup hydroksylowych na atom wodoru, grupę aminową, grupę tiolową lub podobne grupy heteroatomowe. Termin ten obejmuje również pochodne tych związków. Termin ‘ cukier’ jest często stosowany do monosacharydów i niższych oligosacharydów.
Cyklitoli na ogół nie uważa się za węglowodany. Ich nomenklatura podlega innym zaleceniom (patrz P-104 i lit. 39).

P.102.1.2 Monosacharydy

Macierzyste monosacharydy są polihydroksyaldehydami H-$[CHOH]_n$-CHO lub polihydroksyketonami H-$[CHOH]_m$-CO-$[CHOH]_n$-H o trzech lub więcej atomach węgla.

Ogólny termin ‘ monosacharydy’ (jako przeciwstawny do oligo- i polisacharydów) określa pojedynczą jednostkę bez wiązań glikozydowych z innymi takimi samymi jednostkami. Obejmuje on aldozy, dialdozy, aldoketozy, ketozy i diketozy, a także deoksycukry, aminocukry i ich pochodne, pod warunkiem, że macierzysty związek ma grupę karbonylową (ewentualnie potencjalną).

Dla monosacharydów stosuje się zarówno nazwy zwyczajowe jak i systematyczne. Wiele nazw zwyczajowych, takich jak glukoza, fruktoza i inne, jest zachowana i używana do opisu odpowiedniego funkcyjnego związku macierzystego. Ten aspekt nomenklatury węglowodanów jest ograniczony, bowiem dotyczy jedynie monosacharydów mających 4 - 6 atomów węgla. 'Systematyczna nomenklatura węglowodanów' została opracowana i jest stosowana dla związków z czteroma i większą liczbą atomów węgla. Jest ona szeroko używana przez chemików dla cukrów z większą liczbą atomów węgla niż 6 oraz dla cukrów nienasyconych oraz rozgałęzionych. W tych zaleceniach nazwy te określa się mianem 'systematyczne nazwy węglowodanów', w celu odróżnienia ich od nazw systematycznych tworzonych według zasad, reguł i konwencji nomenklatury podstawnikowej omawianej w rozdziałach P-1 do P-9; określanych jako 'nazwy podstawnikowe' albo 'systematyczne nazwy podstawnikowe' (opis i ilustracje dwóch typów nomenklatury patrz P-102.5.2.3).

P.102.1.2.1 Aldozy i ketozy

Monosacharydy z aldehydową grupą karbonylową lub potencjalną aldehydową grupą karbonylową nazywa się aldozami. Monosacharydy z ketonową grupą karbonylową lub potencjalną grupą karbonylową nazywa się ketozami.

Dodatek numerycznego przedrostka (np.: 'pent', 'heks') wskazuje liczbę obecnych atomów węgla (np. aldopentoza, ketoheksoza).

Termin ' potencjalna grupa aldehydowa' odpowiada grupie hemiacetalowej, utworzonej z zamknięcia pierścienia; termin ' potencjalna grupa ketonowa' odpowiada grupie hemiketalowej.

Cykliczne hemiacetale lub hemiketale cukrów z pierścieniem pięcioczłonowym (oksolanu lub tetrahydrofuranu) nazywa się furanozami, a te z sześcioczłonowym pierścieniem (oksanu lub tetrahydropiranu) - piranozami.

Monosacharydy zawierające dwie (potencjalne) grupy aldehydowe nazywa się dialdozami.

Monosacharydy zawierające dwie (potencjalne) grupy ketonowe nazywa się diketozami.

Monosacharydy zawierające jedną (potencjalną) grupę aldehydową i jedną (potencjalną) grupę ketonową nazywa się ketoaldozami; termin ten jest preferowany względem 'aldoketoz' i 'aldozouloz'.

P.102.1.2.2 Deoksycukry

Monosacharydy, w których alkoholowa grupa hydroksylowa została zastąpiona przez atom wodoru są nazywane 'deoksycukrami'.

P.102.1.2.3 Aminocukry

Monosacharydy, w których alkoholowa grupa hydroksylowa została zastąpiona grupą aminową są nazywane aminocukrami. Jeśli zastąpiona jest hemiacetalowa grupa hydroksylowa poprzez grupę aminową, to związki nazywane są 'glikozyloaminami'.

P.102.1.2.4 Glikozydy

Glikozydy są mieszanymi acetalami formalnie powstającymi przez eliminację wody z hemiacetalowej/hemiketalowej grupy hydroksylowej cukru i grupy hydroksylowej drugiego związku. Wiązanie między tymi dwoma składnikami nazywa się 'wiązaniem glikozydowym'.

P.102.1.3 Oligosacharydy

Oligosacharydy są związkami, w których jednostki monosacharydowe połączone są wiązaniami glikozydowymi. Zależnie od liczby jednostek nazyw się je: disacharydami, trisacharydami, itd. Maksymalna liczba jednostek nie jest zdefiniowana.

P.102.1.4 Polisacharydy

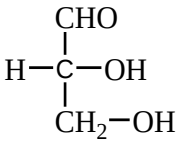
'Polisacharyd' (glikan) jest nazwą nadawaną makromolekułom złożonym z dużej liczby reszt (jednostek) monosacharydowych (glikoz) połączonych wiązaniami glikozydowymi. Termin poli(glikoza) nie jest synonimem polisacharydu (glikanu), ponieważ obejmuje również monosacharydowe reszty połączone wiązaniami nie glikozydowymi.

P-102.2 MACIERZYSTE MONOSACHARYDY

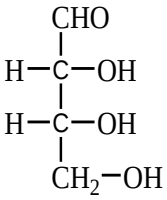
P-102.2.1 Podstawą nazw monosacharydów są ich struktury macierzyste w postaci acyklicznej. Tabele 10.2 i 10.3 podają nazwy zwyczajowe macierzystych aldoz i ketoz zawierających do 6 atomów węgla. Te nazwy zwyczajowo używa się, kiedy acykliczne aldozy lub ketozy mają łańcuch węglowy zbudowany z czterech, pięciu lub sześciu atomów węgla. Gdy węglowy szkielet cukru zbudowany jest z więcej niż sześciu atomów węgla stosuje się systematyczne nazwy węglowodanów.

W Tabeli 10.2 zostały przedstawione wzory, zapisane w postaci łańcuchowej, oraz zachowane nazwy aldoz o 3-6 atomach węgla. Zaprezentowano tylko formy D monosacharydów; formy L są ich odbiciami lustrzanymi.

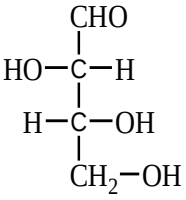
Tabela 10.2 Zachowane i systematyczne nazwy węglowodanowe oraz struktury (w acyklicznej formie aldehydowej) **aldoz o 3 do 6 atomach węgla.**



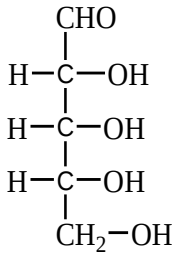
(2*R*)-2,3-dihydroksypropanal
aldehyd D-glicerynowy
D-*glicero*-trioza



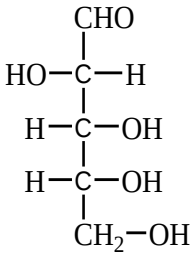
D-erytroza
D-*erytro*-tetroza



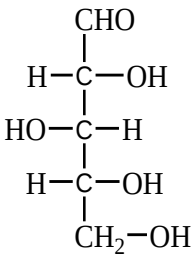
D-treoza
D-*treo*-tetroza



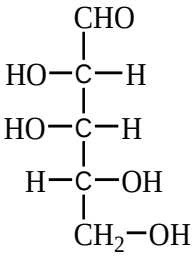
D-ryboza
D-*rybo*-pentoza



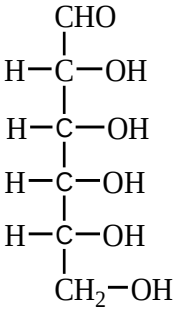
D-arabinoza
D-*arabino*-pentoza



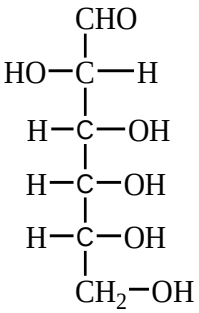
D-ksyloza
D-*ksylo*-pentoza



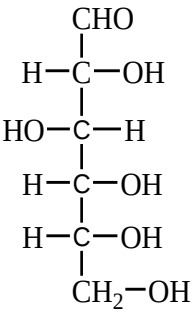
D-liksoza
D-*likso*-pentoza



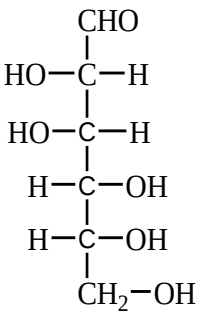
D-alloza
D-*allo*-heksoza



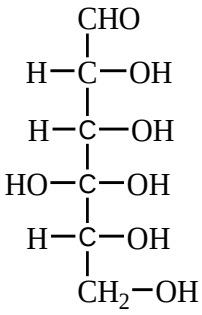
D-altroza
D-*altro*-heksoza



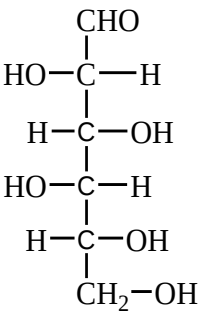
D-glukoza
D-*gluko*-heksoza



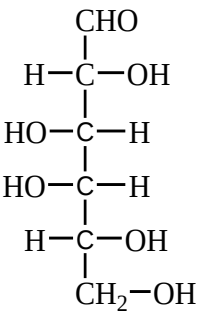
D-mannoza
D-*manno*-heksoza



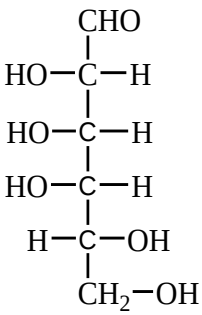
D-guloza
D-*gulo*-heksoza



D-idoza
D-*ido*-heksoza



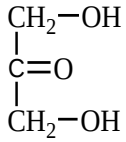
D-galaktoza
D-*galakto*-heksoza



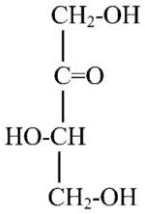
D-taloza
D-*talo*-heksoza

W Tabeli 10.3 zostały przedstawione zachowane nazwy 2-ketoz o 3 - 6 atomach węgla oraz struktury (ketonowej acyklicznej formy). Zaprezentowano tylko formy D monosacharydów; formy L są ich odbiciami lustrzanymi.

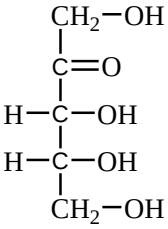
Tabela 10.3. **Struktury oraz zachowane i systematyczne nazwy węglowodanowe 2-ketoz o 3 do 6 atomach węgla.**



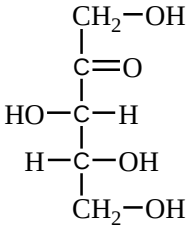
1,3-dihydroksypropan-2-on
1,3-dihydroksyaceton
gliceron



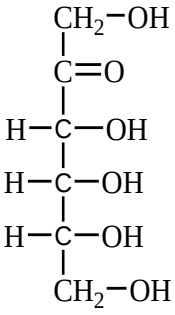
D-erytruloza



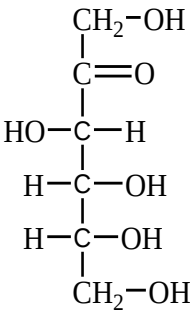
D-rybuloza



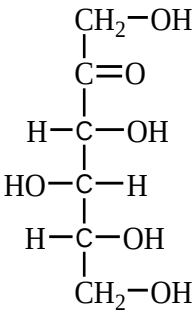
D-ksyluloza



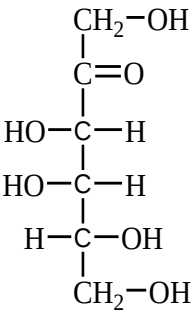
D-psikoza
D-*rybo*-heks-2-uloza



D-fruktoza
D-*arabino*-heks-2-uloza



D-sorboza
D-*ksylo*-heks-2-uloza



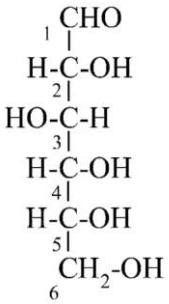
D-tagatoza
D-*likso*-heks-2-uloza

P-102.2.2 Numerowanie struktur macierzystych

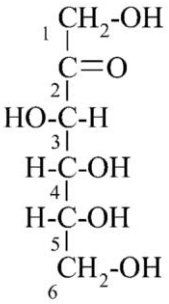
Atomy węgla monosacharydu numeruje się kolejno w następujący sposób:

(1) Grupa (potencjalnie) aldehydowa otrzymuje lokant 1 (nawet wtedy, gdy obecna jest grupa charakterystyczna o wyższym starszeństwie;
(2) Inne grupy charakterystyczne o jak najwyższym starszeństwie, wymieniane jako przyrostki, otrzymują możliwie najniższe lokanty, np.: grupa karboksylowa (pochodne) > grupa (potencjalnie) ketonowa karbonylowa.

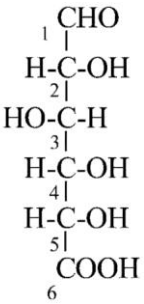
Przykłady:



D-glukoza



D-fruktoza

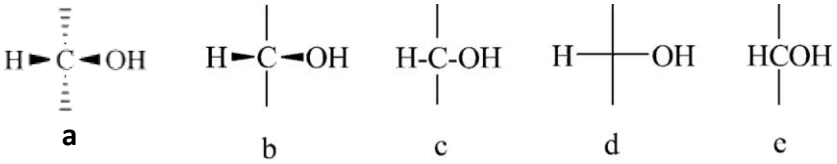


kwas D-glukuronowy

P-102.3 SYMBOLIKA KONFIGURACYJNA

P-102.3.1 Projekcja Fishera izomerów łańcuchowych

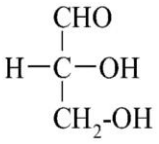
W tej projekcji łańcuch węglowy monosacharydu zapisuje się pionowo, z atomem węgla o najniższym lokancie u góry, jak pokazano w P-102.2.2. Przy określaniu stereochemii każdy rozważany kolejno atom węgla umieszcza się jako leżący w płaszczyźnie papieru; sąsiadujące atomy węgla leżą pod, a atom H i grupa –OH nad płaszczyzną papieru. Poniżej podane są różne sposoby przedstawiania, 'b', 'c', 'd' i 'e' atomu węgla w monosacharydzie w projekcji Fishera (struktura 'a' jest trójwymiarową reprezentacją, rzeczywistą projekcją Fishera jest 'd'). W niniejszych zaleceniach na ogół stosowana jest reprezentacja 'c'.



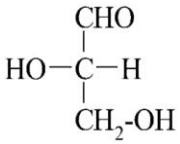
a b c d e

P-102.3.2 Stereodeskryptory 'D' i 'L'

Najprostszą aldozą jest aldehyd glicerynowy. Ma on jedno centrum chiralności, stąd występuje w dwóch odmianach enancjomerycznych, zwanych aldehydem D-glicerynowym i aldehydem L-glicerynowym; przedstawiają je poniższe wzory projekcyjne Fishera. Wiadomo że te projekcje odpowiadają konfiguracjom absolutnym. Stereodeskryptory konfiguracyjne 'D' oraz 'L' pisze się mniejszymi dużymi literami i oddziela od nazwy cukru łącznikiem. Konfiguracja jest często opisywana symbolami *R* i *S* według konwencji CIP.



aldehyd D-glicerynowy
(2*R*)-2,3-dihydroksypropanal

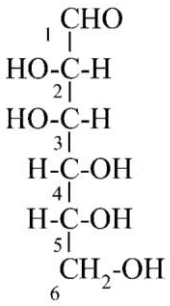


aldehyd L-glicerynowy
(2*S*)-2,3-dihydroksypropanal

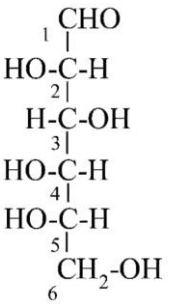
P-102.3.3 Atom konfiguracyjny

Monosacharyd należy do szeregu D lub L zależnie od konfiguracji centrum chiralności o najwyższym lokancie. Ten asymetrycznie podstawiony atom węgla nazywa się ‘atomem konfiguracyjnym’. I tak, jeśli jego grupa hydroksylowa jest rzutowana na prawo w projekcji Fishera, to cukier należy do szeregu D i otrzymuje stereodeskryptor ‘D’.

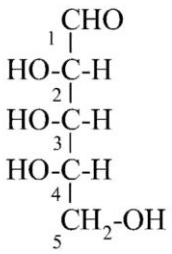
Przykłady:



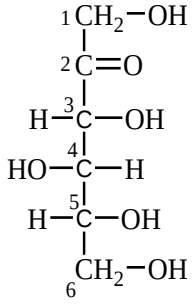
D-mannoza



L-glukoza



L-ryboza



D-sorboza

P-102.3.4 Cykliczne formy monosacharydów

Większość monosacharydów występuje jako cykliczne hemiacetale lub hemiketale. Należy wziąć pod uwagę dwa aspekty wewnętrznej cyklizacji monosacharydów: pierwszy to wielkość pierścienia a drugi to konfiguracja nowo powstałego centrum chiralności.

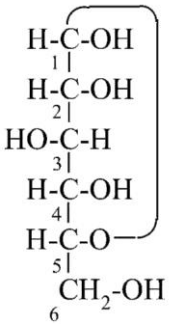
P-102.3.4.1 Wielkość pierścienia

Spośród różnych możliwych wielkości heterocyklicznych pierścieni będącego wynikiem tworzenia hemiacetali lub hemiketali, pięcio- i sześcioczłonowe, wliczając atom tlenu, są uprzywilejowane i będą omówione w tym rozdziale. Ich nazwy są oparte na nazwach macierzystych struktur heterocyklicznych, odpowiednio, furanu i piranu. Nazwy tworzy się przez włączenie terminu ‘furan’ i ‘piran’ przed końcówką ‘oza’ w nazwie cukru. Na przykład: D-mannoza jest zmieniana na D-mannopiranozę, co wskazuje cykliczną formę pierścienia sześcioczłonowego; co więcej ogólny termin ‘piranoza’ obejmuje wszystkie cukry zawierające strukturę sześcioczłonowego pierścienia. Podobnie cukry mające strukturę pięcioczłonowych pierścieni są ‘furanozami’. Cykliczne struktury trój-, cztero- i siedmioczłonowe nazywa się, odpowiednio, ‘oksyrozami’, ‘oksetozami’ i ‘septanozami’.

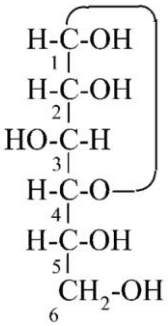
Należy uwzględnić różne reprezentacje form pierścieniowych

P-102.3.4.1.1 Utworzenie hemiacetalu lub hemiketalu w projekcji Fishera formy cyklicznej przedstawia się rysując długie wiązanie łączące wyjściową grupę aldehydową lub ketonową z atomem tlenu uczestniczącym w pierścieniu.

Przykłady:



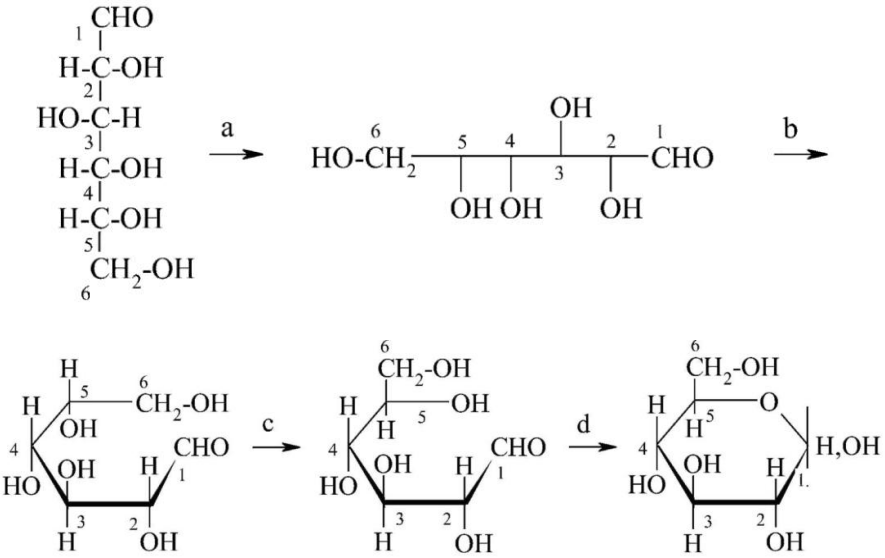
D-glukopiranoza



D-glukofuranoza

P-102.3.4.1.2 Projekcje Hawortha

Projekcja Hawortha jest rysunkiem perspektywicznym . Pierścień jest zorientowany prawie prostopadle do płaszczyzny papieru ale obserwowany nieco z góry, przez co krawędź bliższa obserwatora jest rysowana niżej niż krawędź dalsza z atomem tlenu z tyłu i C-1 na prawym krańcu. Proces cyklizacji przedstawia się jako zachodzący etapami, co pokazano na rysunku 10.1 na przykładzie D-glukopiranozy.



Rysunek 10.1 Reorientacja projekcji Fishera na projekcję Hawortha.

Do przeprowadzenia acetalizacji lub ketalizacji są konieczne dwie reorientacje standardowej projekcji Fishera. Pierwsza reorientacja (etap a) polega na pionowym umieszczeniu nieterminalnych grup hydroksylowych; druga z kolei (etap c) polega na reorientacji atomu węgla C-5, w celu umieszczenia atomu tlenu w płaszczyźnie pierścienia. Sposób cyklizacji musi być jednoznacznie zdefiniowany poprzez określenie konfiguracji na atomie C-1.

P-102.3.4.2 Formy anomeryczne; stereodeskryptory ‘α’ i ‘β’

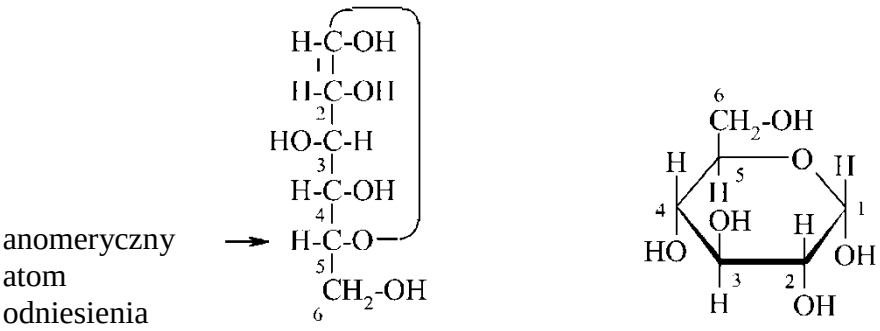
P-102.3.4.2.1 Nalezy określić konfigurację nowo utworzonego centrum chiralności przy C-1. To centrum nazywa się centrum anomerycznym. Nowe stereoizomery nazywa się ‘anomerami’, i oznacza się je stereodeskryptorami ‘α’ oraz ‘β’, stosownie do względnej konfiguracji centrum anomerycznego względem konfiguracji centrum referencyjnego.

P-102.3.4.2.2 Konfiguracja ‘α’oraz ‘β’ monosacharydów

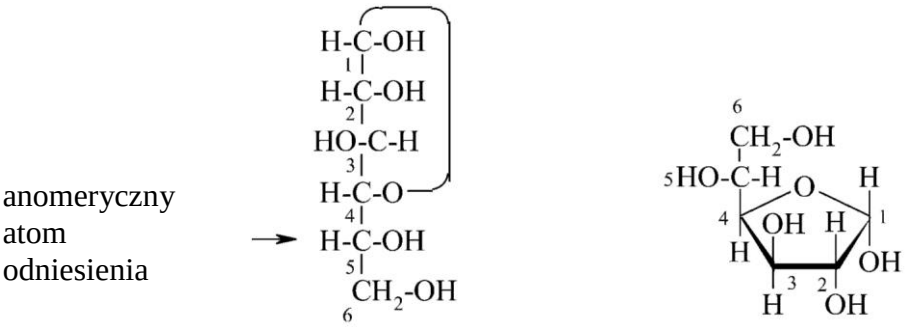
Anomerycznym centrum referencyjnym monosacharydu mającego zachowaną nazwę jest atom konfiguracyjny, jak zdefiniowano w P-102.3.3. W projekcji Fishera egzocykliczny atom tlenu centrum anomerycznego, w anomerze α, jest formalnie *cis* względem tlenu związanego z anomerycznym referencyjnym atomem; w anomerze β relacja jest *trans*. W celu określenia konfiguracji *cis* i *trans* płaszczyzna odniesienia jest prostopadła względem projekcji Fishera, zawierając wszystkie atomy węgla monosacharydu.

‘Stereodeskryptor anomeryczny’ ‘α’ lub ‘β’z łącznikiem umieszcza się bezpośrednio przed stereodeskryptorem konfiguracyjnym ‘D’ lub ‘L’ nazwy węglowodanu.

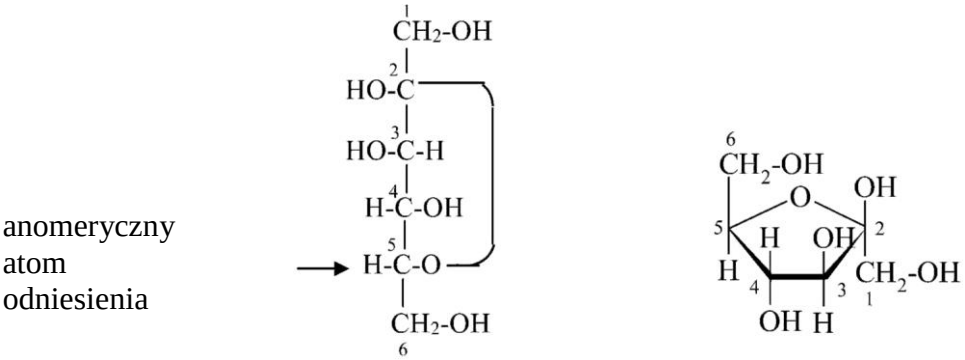
Przykłady:



α-D-glukopiranoza



α-D-glukofuranoza

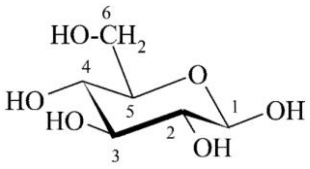


β-D-fruktofuranoza

P-102.3.5 Konformacja monosacharydów

Piranozy przyjmują konformacje nie planarne. Na przykład β-D-glukopiranoza przyjmuje konformację krzesłową z charakterystycznymi podstawnikami w położeniu ekwatorialnym (atomy wodoru przyłączone do pierścienia są pominięte).

Przykład:

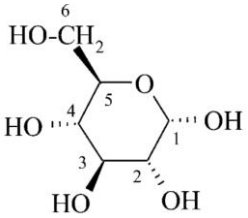


β-D-glukopiranoza

P-102.3.6 Wzory Millsa

W takim wzorze główny pierścień hemiacetalowy jest rysowany w płaszczyźnie papieru; wiązania przerywane oznaczają podstawniki pod tą płaszczyzną, a wiązania pogrubione – nad płaszczyzną.

Przykład:



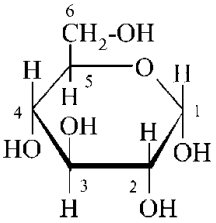
α-D-glukopiranoza

P-102.3.7 Stereodeskryptory dla określenia racematów oraz nieokreślonej konfiguracji

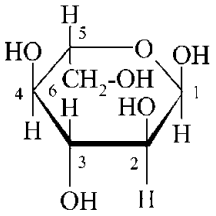
P-102.3.7.1 Stereodeskryptory dla określenia racematów

Racematy wskazuje się stereodeskryptorem ‘DL’.

Przykłady:

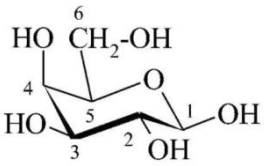


i

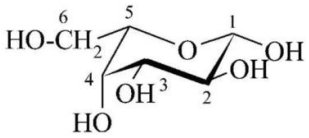


D-konfiguracja L-konfiguracja

α-DL-glukopiranoza



i



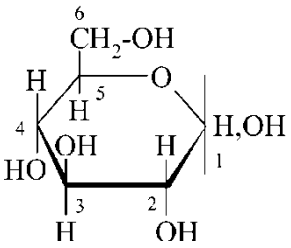
D-konfiguracja L-konfiguracja

β-DL-galaktopiranoza

P-102.3.7.2 Mieszaniny anomerów

W przypadku opisywania mieszaniny anomerów, stereodeskryptory ‘α’ i ‘β’ umieszcza się bezpośrednio przed nazwą oddzielając je przecinkiem; we wzorach Hawortha symbole H i OH zastępują wiązania przy anomerycznym atomie węgla.

Przykład:



α,β-D-glukopiranoza

P-102.4 WYBÓR STRUKTURY MACIERZYSTEJ

Jeśli w dużej cząsteczce wbudowana jest więcej niż jedna struktura monosacharydu, to wyboru struktury macierzystej dokonujemy stosując kolejno następujące kryteria, aż do rozstrzygnięcia:

a) struktura macierzysta zawierająca grupę funkcyjną najstarszą w porządku klas (patrz P-41). Jeśli możliwy jest wybór, to dokonujemy go na podstawie największej liczby występowania najstarszych grup funkcyjnych.
   I tak: kwas ketoaldarowy / kwas aldarowy >
   kwas ketouronowy / kwas uronowy / kwas ketoaldonowy / kwas aldonowy >
   dialdoza > ketoaldoza / aldoza > diketoza > ketoza.

b) struktura macierzysta o większej liczbie atomów węgla w łańcuchu, np.: heptoza > heksoza.

c) struktura macierzysta pierwsza w porządku alfabetycznym opartym na:

   (i) nazwie zwyczajowej lub przedrostku konfiguracyjnym nazwy systematycznej, np.: glukoza > guloza; pochodna *gluko* > *gulo*,
   Przykład: D-glucitol, nie L-gulitol (patrz P-102.5.6.5.1).

   (ii) symbolu konfiguracyjnym: D > L,
   Przykład: 5-*O*-metylo-D-galaktitol, nie 2-*O*-metylo-L-galaktitol (patrz P-102.5.6.5.2)

   (iii) stereodeskryptorze anomerycznym: α > β,
   Przykład: 1,2′:1′,2-dianhydryd α-D-fruktofuranozy β-D-fruktofuranozy, nie 1,2':1',2-dianhydryd β-D-fruktofuranozy α-D-fruktofuranozy (patrz P-102.5.6.7.2).

d) struktura macierzysta mająca więcej podstawników wymienianych w przedrostku (podstawienie mostkowe, np.: 2,3-*O*-metyleno jest tu traktowane jako dwa podstawniki). Przedrostek ‘deoksy’ i ‘anhydro’ są rozłączne i uporządkowane alfabetycznie a więc traktowane jako osobne podstawniki.

e) struktura macierzysta z najniższymi lokantami dla podstawników wymienianych w przedrostku,
Przykład: 2,3,5-tri-*O*-metylo-D-mannitol przed 2,4,5-tri-*O*-metylo-D-mannitol (patrz P-102.5.6.5.3(a)).

f) struktura macierzysta z najniższym lokantem dla podstawnika wymienianego jako pierwszy,
Przykład: 2-*O*-acetylo-5-*O*-metylo-D-mannitol, nie 5-*O*-acetylo-2-*O*-metylo-D-mannitol [patrz P-102.5.6.5.3(b)].

P-102.5 MONOSACHARYDY: ALDOZY I KETOZY; DEOKSY- I AMINOCUKRY

P-102.5.1 Aldozy
P-102.5.2 Ketozy
P-102.5.3 Deoksycukry
P-102.5.4 Aminocukry
P-102.5.5 Tiocukry
P-102.5.6 Podstawione monosacharydy

P-102.5.1 Aldozy

Aldozy mają nazwy zachowane lub tworzone podstawnikowo. Zachowane i semi-systematyczne węglowodanowe nazwy aldoz zawierających od trzech do sześciu atomów węgla są wymienione w Tabeli 10.2.

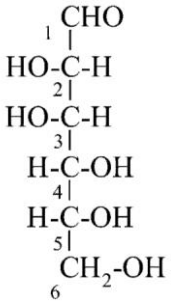
Nazwy aldoz zawierających więcej niż sześć atomów węgla tworzone są w dwojaki sposób: według procedur systematycznej nomenklatury węglowodanowej lub systematycznej nomenklatury podstawnikowej.

P-102.5.1.1 Systematyczne nazwy węglowodanowe

Systematyczne węglowodanowe nazwy aldoz tworzy się z nazwy rdzenia i przedrostka konfiguracyjnego (lub przedrostków). Aldozy zawierające od trzech do dziesięciu atomów węgla mają następujące nazwy rdzeni: trioza, tetroza, pentoza, heksoza, heptoza, oktoza, nonoza, dekoza. Łańcuch numeruje się tak, aby grupa karbonylowa miała lokant ‘1’.

P-102.5.1.1.1 Konfigurację grup >CHOH cukru wyraża się przedrostkiem (lub przedrostkami) wymienionymi w Tabeli 10.2, np.: ‘*glicero*’, ‘*gluko*’, ‘*manno*”, itd. Każda nazwa określona jest stereodeskryptorem D lub L, jak opisano w P-102.3.2.

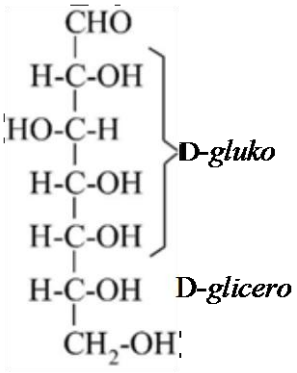
Przykład:



D-*manno*-heksoza (systematyczna nazwa węglowodanowa)
D-mannoza (nazwa zachowana)

P-102.5.1.1.2 Aldozy zawierające więcej niż cztery centra chiralności nazywa się dodając dwa (lub więcej) przedrostki konfiguracyjne do nazwy rdzenia. Przedrostki, przypisuje się kolejno grupom centrów chiralności, w grupach po cztery, zaczynając od grup położonych najbliżej grupy aldehydowej. Przedrostek odnoszący się do grupy atomów węgla dalszych od grupy aldehydowej (może zawierać mniej niż cztery centra chiralności) wymienia się w nazwie jako pierwszy.

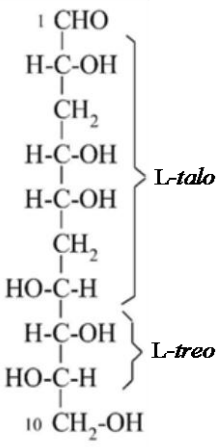
Przykład:



D-*glicero*-D-*gluko*-heptoza
(nie D-*gluko*-D-*glicero*-heptoza)
(2*R*,3*S*,4*R*,5*R*,6*R*)-2,3,4,5,6,7-heksahydroksyheptanal

P-102.5.1.1.3 Jeśli kolejne centra chiralności rozdzielone są centrami achiralnymi, to te ostatnie ignorujemy, a przedrostek (dla czterech lub mniej centrów) lub przedrostki konfiguracyjne (dla więcej niż czterech centrów) ustalamy dla zestawu centrów chiralności.

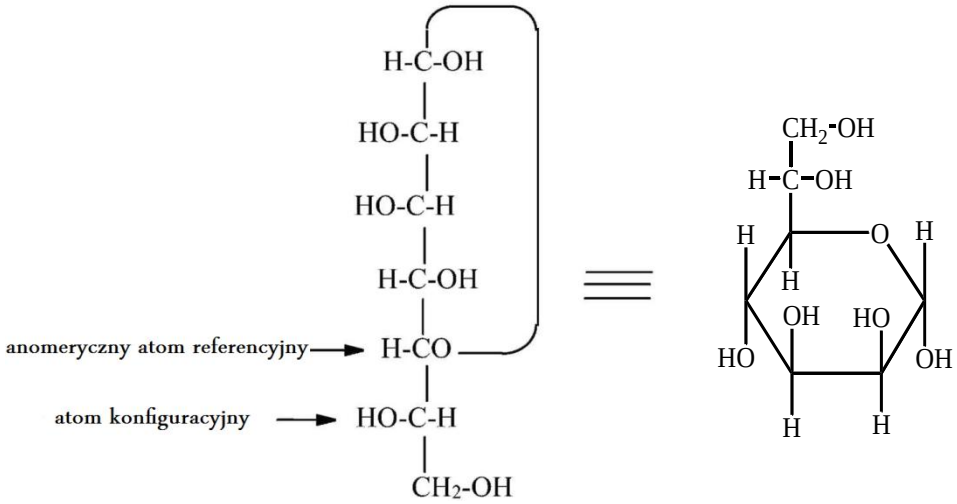
Przykład:



3,6-dideoksy-L-*treo*-L-*talo*-dekoza
(dla deoksycukrów patrz P-102.5.3)
(2*R*,4*S*,5*R*,7*R*,8*S*,9*S*)-2,4,5,7,8,9,10-heptahydroksydekanal

P-102.5.1.1.4 Formy cykliczne

Dla monosacharydów mających więcej niż sześć atomów węgla, anomerycznym centrum referencyjnym jest atom węgla o najwyższym lokancie w grupie centrów chiralności, sąsiadujący z centrum anomerycznym, zawartym w pierścieniu heterocyklicznym i oznaczonym jednym przedrostkiem konfiguracyjnym. Egzocykliczny atom tlenu centrum anomerycznego, w anomerze α, jest formalnie *cis*, w projekcji Fishera, względem atomu tlenu związanego z anomerycznym atomem referencyjnym; w anomerze β te atomy tlenu są formalnie *trans*.



L-*glicero*-α-D-*manno*-heptopiranoza
(2*S*,3*S*,4*S*,5*S*,6*R*)-6-[(1*S*)-1,2-dihydroksyetylo]oksano-2,3,4,5-tetraol

P-102.5.2 Ketozy

P-102.5.2.1 Klasyfikacja

Ketozy klasyfikuje się jako 2-ketozy, 3-ketozy etc. zgodnie z najniższym lokantem pozycji (potencjalnej) grupy karbonylowej.

P-102.5.2.2 Nazwy zachowane

Zachowane nazwy i struktury są przedstawione w Tabeli 10.3; konfiguracja jest określona stereodeskryptorami 'D' lub 'L' zdefiniowanymi w P-102.2.

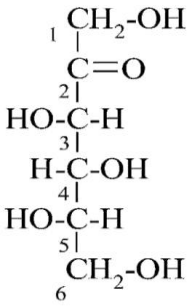
P-102.5.2.3 Systematyczne nazwy węglowodanowe

Systematyczne nazwy węglowodanowe ketoz zawierających od czterech do sześciu atomów węgla tworzy się z nazwy rdzeni oraz odpowiedniego przedrostka konfiguracyjnego wymienionego w Tabeli 10.3. Rdzenną nazwę tworzy się z nazwy rdzenia odpowiedniej aldozy zamieniając końcówkę 'oza' na 'uloza' poprzedzoną lokantem grupy karbonylowej, np.: pent-2-uloza i heks-3-uloza. Numerowanie łańcucha jest takie, aby grupa karbonylowa otrzymała najniższy z możliwych lokantów. Jeśli grupa karbonylowa jest w środku łańcucha o nieparzystej liczbie atomów węgla, to wyboru miedzy alternatywnymi nazwami dokonuje się według P-102.4.

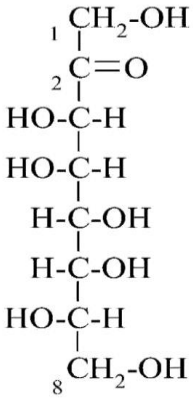
Przedrostki konfiguracyjne 2-ketoz przypisuje się tak samo jak w przypadku aldoz.

Poniżej nazwy podstawnikowe są podane po ‘systematycznych nazwach węglowodanowych’ w celu zilustrowania dwóch typów nazw systematycznych zalecanych w nomenklaturze węglowodanów.

Przykłady:



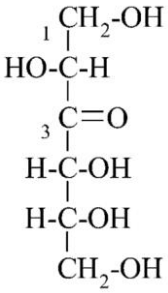
L-*ksylo*-heks-2-uloza
L-sorboza



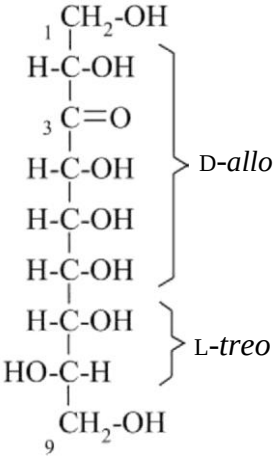
L-*glicero*-D-*manno*-okt-2-uloza
(3*S*,4*S*,5*R*,6*R*,7*S*)-1,3,4,5,6,7,8-heptahydroksyoktan-2-on

W przypadku ketoz z grupą karbonylową na C-3 lub na wyżej numerowanym atomie węgla grupę karbonylową pomija się, a zestawowi centrów chiralności daje się właściwy przedrostek lub przedrostki zgodnie z Tabelą 10.3.

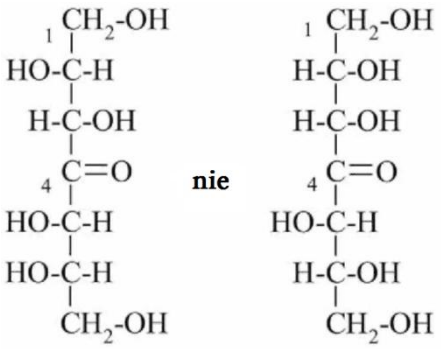
Przykłady:



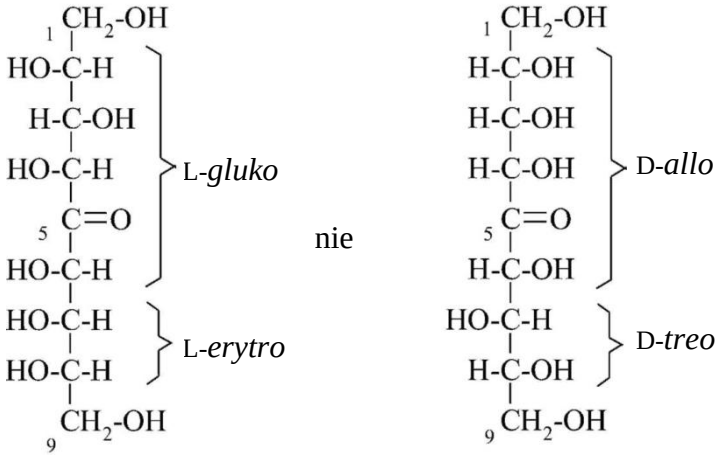
D-*arabino*-heks-3-uloza
(2*R*,4*R*,5*R*)-1,2,4,5,6 -pentahydroksyheksan-3-on



L-*treo*-D-*allo*-non-3-uloza
(2*S*,4*R*,5*R*,6*R*,7*R*,8*S*)-1,2,4,5,6,7,8,9-oktahydroksynonan-3-on



L-*gluko*-hept-4-uloza
(nie D-*gulo*-hept-4-uloza; *gluko* jest wcześniej w alfabetycznym porządku, patrz P-102.4(c))
(2*R*,3S,5S,6*S*)-1,2,3,5,6,7-heksahydroksyheptan-4-on
[nie (2*S*,3S,5S,6*R*)-1,2,3,5,6,7-heksahydroksyheptan-4-on; kiedy istnieje wybór to konfigurację *R* przypisuje się najniższemu lokantowi, patrz P-14.4(j)]



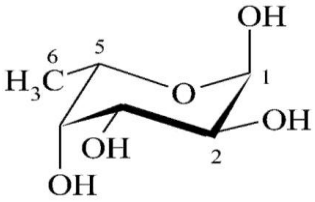
L-*erytro*-L-*gluko*-non-5-uloza
(nie D-*treo*-D-*allo*-non-5-uloza; *erytro-gluko* jest wcześniej w alfabetycznym porządku)
(2*R*,3*S*,4*R*,6*S*,7*S*,8*S*)-1,2,3,4,6,7,8,9-oktahydroksynonan-5-on

P-102.5.3 Deoksycukry

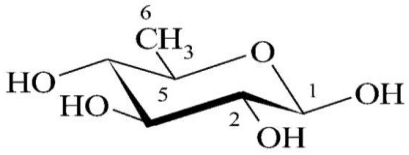
P-102.5.3.1 Przedrostek ‘deoksy’ określa usunięcie grupy ‘oksy’ (-*O*-), z ponownym przyłączeniem atomu wodoru. W tych zaleceniach przedrostek ‘deoksy’ klasyfikuje się jako rozłączny, a więc jest alfabetyzowany z innymi podstawnikami wynikającymi z nomenklatury podstawnikowej. To jest zmiana w odniesieniu do poprzednich zaleceń (patrz R-0.1.8.4, lit.2), która klasyfikowała przedrostek ‘deoksy’ pośród przedrostków nierozłącznych (zobacz również przedrostek ‘anhydro’, obecnie klasyfikowany jako rozłączny i alfabetyzowany z innymi rozłącznymi przedrostkami).

P-102.5.3.2 Nazwy zwyczajowe

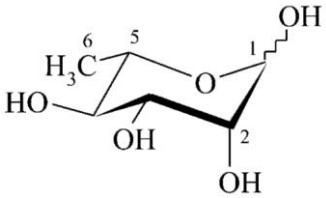
Zachowane są następujące nazwy: fukoza, chinowoza i ramnoza. Ich struktury przedstawiono poniżej w formach piranozowych.



α-L-fukopiranoza
6-deoksy-α-L-galaktopiranoza



β-D-chinowopiranoza
6-deoksy-β-D-glukopiranoza



L-ramnopiranoza
6-deoksy-L-mannopiranoza

P-102.5.3.3 Nazwy węglowodanów wywodzące się z nazw zachowanych

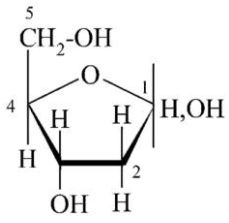
Przedrostek ‘deoksy’ stosuje się w kombinacji z zachowaną nazwą jeśli deoksygenacja nie narusza konfiguracji żadnego centrum chiralności, np.: 6-deoksy-D-alloza. Jednakże 6-deoksy pochodne glukozy, mannozy i galaktozy mają własne zachowane nazwy zwyczajowe (patrz P-102.5.3.2). Jeśli przedrostek ‘deoksy’ modyfikuje centrum chiralności, to w takich wypadkach preferowane jest nazwa węglowodanowa; stosowne są nazwy utworzone za pomocą nomenklatury podstawnikowej ze stereodeskryptorami CIP (przykłady: patrz P-102.5.3.4).

Dozwolone jest połączenie przedrostków ‘amino’ i ‘deoksy’ w tej samej pozycji (jak również przedrostków zawsze wymienianych jako przedrostki w nomenklaturze podstawnikowej jak opisane w P-59.1.9 i ‘deoksy’ w tej samej pozycji)

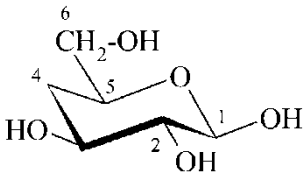
P-102.5.3.4 Nazwy systematyczne węglowodanów

Systematyczna nazwa węglowodanowa składa się z przedrostka ‘deoksy’ poprzedzonego lokantem, po których następuje nazwa rdzenia z takim przedrostkiem konfiguracyjnym, który opisuje konfiguracje centrów chiralności obecnych w deoksy związku. Przedrostki konfiguracyjne wymienia się kolejno, rozpoczynając od C-1. Zastosowanie przedrostka ‘deoksy’ z zachowanymi nazwami aldoz i ketoz nie jest zalecane

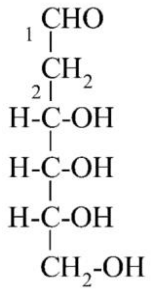
Przykłady:



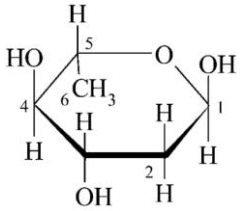
2-deoksy-D-*erytro*-pentofuranoza
(często określana jako 2-deoksyrybofuranoza
lub 2-deoksy-D-ryboza)
(2ζ,4*S*,5*R*)-5-(hydroksymetylo)oksolano-2,4-diol



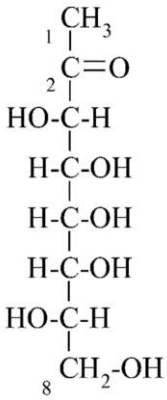
4-deoksy-β-D-*ksylo*-heksopiranoza
(nie 4-deoksy-β-D-galaktopiranoza)
(2*R*,3*R*,4*S*,6*S*)-6-(hydroksymetylo)oksano-2,3,4-triol



2-deoksy-D-*rybo*-heksoza
(nie 2-deoksy-D-alloza)
(3*S*,4*S*,5*R*)-3,4,5,6-tetrahydroksyheksanal



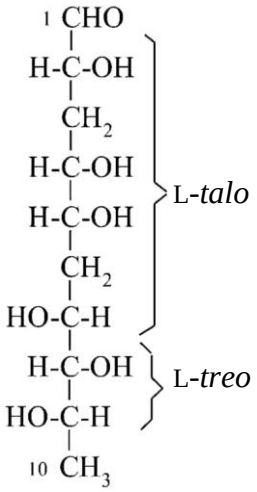
2,6-dideoksy-α-L-*arabino*-heksopiranoza
(2*R*,4*S*,5*R*,6*S*)-6-metylooksano-2,4,5-triol



1-deoksy-L-*glicero*-D-*altro*-okt-2-uloza
(3*S*,4*R*,5*R*,6*R*,7*S*)-3,4,5,6,7,8-heksahydroksyoktan-2-on

Jeśli grupa –CH_2– rozdziela centra chiralności na dwie serie, jest to pomijane w określaniu przedrostka konfiguracyjnego; przypisany przedrostek (lub przedrostki) musi objąć pełny zbiór centrów chiralności (patrz aldozy) (patrz P-102.5.1.1.3).

Przykład:



3,6,10-trideoksy-L-*treo*-L-*talo*-dekoza
(2*R*,4*S*,5*R*,7*R*,8*R*,9*S*)-2,4,5,7,8,9-heksahydroksydekanal

P-102.5.4 Aminocukry i tiocukry oraz inne analogi chalkogenowe

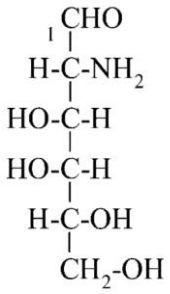
Zastąpienie grupy hydroksylowej monosacharydu lub pochodnej monosacharydu, nie będącej anomeryczną grupą hydroksylową, grupą aminową jest traktowane jako podstawienie właściwego atomu wodoru przez grupę aminową w odpowiednim deoksymonosacharydzie. Kofiguracja atomu węgla związanego z grupą aminową jest wyrażona tak jak dla aldoz, z potraktowaniem grupy aminowej jako odpowiednika grupy hydroksylowej.

Przeciwnie, zastąpienie grupy hydroksylowej grupą sulfonylową jest traktowane jako zamiana funkcji i wskazuje się przedrostkiem ‘tio’.

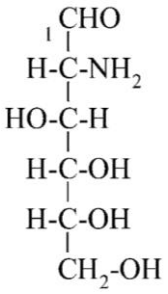
P-102.5.4.1 Aminocukry

P-102.5.4.1.1 Nazwy zwyczajowe

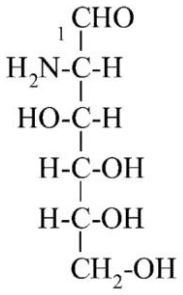
Zachowane są następujące nazwy glikozyloamin:



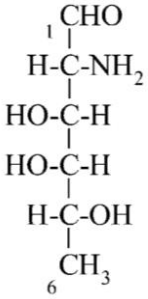
D-galaktozamina
2-amino-2-deoksy-D-galaktoza



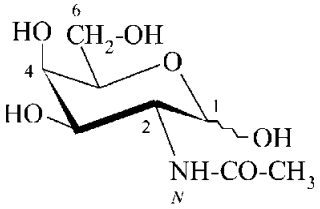
D-glukozamina
2-amino-2-deoksy-D-glukoza



D-mannozamina
2-amino-2-deoksy-D-mannoza



D-fukozamina
2-amino-2,6-dideoksy-D-galaktoza

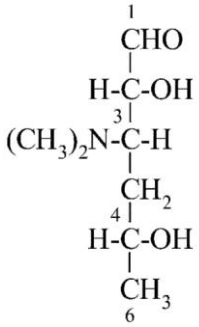


N-acetylo-D-galaktozoamina
2-acetamido-2-deoksy-D-galaktozopiranoza

P-102.5.4.1.2 Systematyczne nazwy węglowodanów

Systematyczne nazwy węglowodanów tworzy się dwuetapowo: w pierwszym etapie, w wyniku deoksygenacji na atomie węgla, powstaje deoksy cukier, na który w kolejnym etapie, w wyniku substytucji, winna być wprowadzona grupa aminowa. Nazwy podstawionych amin tworzy się używając podstawioną grupę aminową jako przedrostek.

Przykład:



3,4,6-trideoksy-3-(dimetyloamino)- D-*ksylo*-heksoza
(2*R*,3*S*,5*R*)-3-(dimetyloamino)-2,5-dihydroksyheksanal

P-102.5.5 Tiocukry i inne chalkogenowe analogi

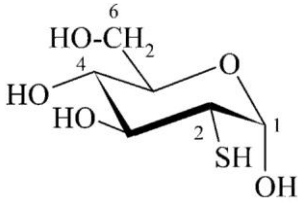
Zamianę atomu tlenu grupy hydroksylowej w aldozie lub ketozie czy atomu tlenu grupy karbonylowej łańcuchowej formy adozy lub ketozy na atom siarki, selenu lub teluru, wskazuje się umieszczając przedrostek, odpowiednio, ‘tio’, ‘seleno lub, ‘teluro’, poprzedzony właściwym lokantem, przed systematyczną lub zwyczajową nazwą aldozy lub ketozy. W nomenklaturze węglowodanów przedrostki ‘tio’, ‘seleno’, ‘telluro’ są traktowane jako rozłączne, a więc alfabetyzowane z innymi przedrostkami.

Zamianę pierścieniowego atomu tlenu cyklicznej formy aldozy lub ketozy na atom siarki, selenu lub telluru wskazuje się w ten sam sposób; jako lokantu używa się lokant sąsiedniego, nie

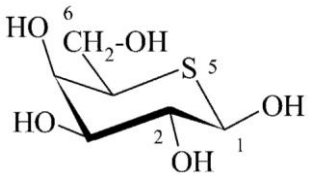
anomerycznego atomu węgla. W takim przypadku nie zaleca się wyrażania zamiany szkieletu za pomocą przedrostków ‘a’ zamiany.

Sulfotlenki (i selenotlenki lub telurotlenki) oraz sulfony (i selenony lub tellurony) nazywa się nomenklaturą klasowo-funkcyjną (patrz P-63.6 nazwy klasowo-funkcyjne sulfotlenków i sulfonów).

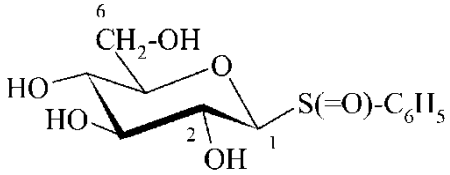
Przykłady:



2-tio-α-D-glukopiranoza



5-tio-β-D-galaktopiranoza



sulfoksyd β-D-glukopiranozylu fenylu
(dla grup glikozylowych patrz P-102.6.1.1)
(2*S*,3*R*,4*S*,5*S*,6*R*)-2-(benzenosulfinylo)-6-(hydroksymetylo)oksano-3,4,5-triol

P-102.5.6 Pochodne monosacharydów

P-102.5.6.1 *O*-podstawienie
P-102.5.6.2 Glikozydy
P-102.5.6.3 *C*-podstawienie
P-102.5.6.4 *N*-podstawienie
P-102.5.6.5 Alditole
P-102.5.6.6 Kwasy karboksylowe pochodne monosacharydów
P-102.5.6.7 Anhydrydy

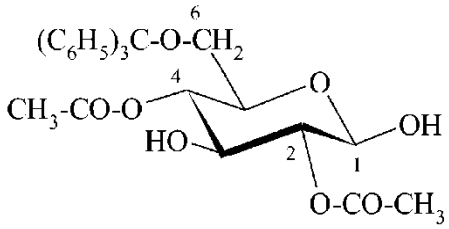
P-102.5.6.1 *O*-podstawienie

W celu zachowania integralności struktur i wykorzystania zachowanych nazw wskazujących absolutną konfigurację, *O*-podstawienie jest dopuszczalne w nomenklaturze węglowodanów. Podstawniki zastępujące atom wodoru w alkoholowej grupie hydroksylowej cukru lub pochodnej cukru są określane jako *O*-podstawniki. Podstawienie anomerycznej grupy hydroksylowej jest omówione w P-102.5.6.3.2. Lokant ‘*O*-’ nie jest powtarzany przy wielokrotnym podstawieniu tym samym atomem lub grupą. Jeśli trzeba stosuje się cyfrowe lokanty określające położenie podstawników; nie są one potrzebne przy pełnym podstawieniu przez identyczne grupy.

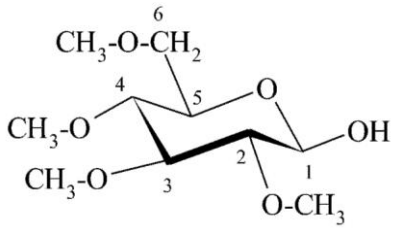
P-102.5.6.1.1 Pochodne *O*-acetylowe i *O*-alkilowe

Nazwy *O*-acylowych pochodnych, w których kwasowy komponent jest wymieniany jako osobne słowo z końcówką ‘an/ian’ na początku, przed nazwą monosacharydu są preferowane względem nazw z przedrostkami *O*-acetylo, *O*-acylo. Jednak kiedy końcówka ‘-oza’ jest zmieniona (np.: w celu wskazania glikozylu lub funkcji kwasowej mających starszeństwo względem estru) to wymagany jest przedrostek *O*-acylo. Pochodne *O*-alkilowe zawsze określa się przedrostkami.

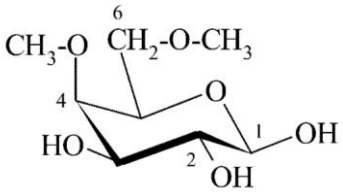
Przykłady:



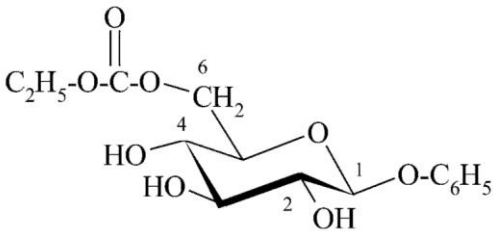
2,4-dioctan 6-*O*-trytylo-D-glukopiranozy



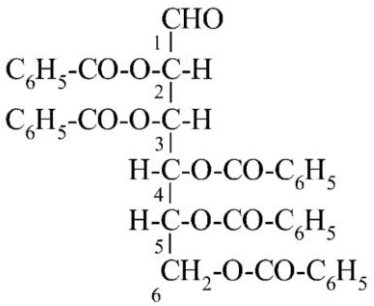
2,3,4,6-tetra-*O*-metylo-β-D-glukopiranoza



4,6-di-*O*-metylo-β-D-galaktopiranoza



6-(etylokarbonian) β-D-glukopiranozydu fenylu



2,3,4,5,6-pentabenzoesan D-mannozy

P-102.5.6.1.2 Estry kwasu fosforowego

Estry cukrów z kwasem fosforowym są zwykle nazywane ‘fosforanami’. Termin ‘fosforan’w biochemii wskazuje resztę fosforanową, niezależnie od stanu jonizacji i rodzaju przeciwjonu.

Jednakże nazwy systematyczne muszą odróżniać prawdziwy fosforan $–O-PO(O^-)_2$ od kwaśnego fosforanu, np. $–O-PO(OH)_2$ nazywanego ‘fosforan diwodoru’.

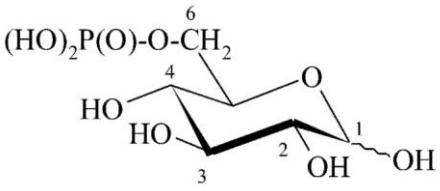
Przedrostki ‘fosfono’ dla $–PO(OH)_2$ i ‘fosfoniano’ dla $–PO(O^-)_2$ są także używane do wskazania pochodnych kwasu *O*-fosfonowego

W nomenklaturze biochemicznej zamiast ‘fosfono; i ‘fosfoniano’ używany jest termin ‘fosfo-’.

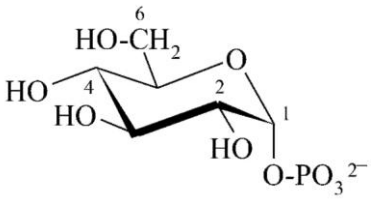
Jeśli cukier estryfikowany jest dwiema lub większą liczbą grup fosforanowych, to stosowane są numeryczne określenia ‘bis’, ‘tris’ i związek nazywa się ‘bis(fosforan)’, ‘tris(fosforan)’.

Terminologia dla fosfonianów jest analogiczna jak w przypadku fosforanów.

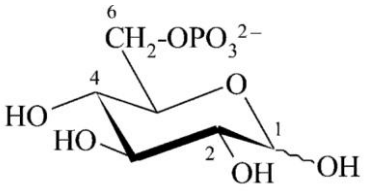
Przykłady:



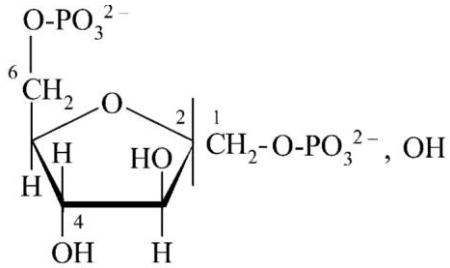
6-fosforan diwodoru D-glukopiranozy
6-*O*-fosfono-D-glukopiranoza



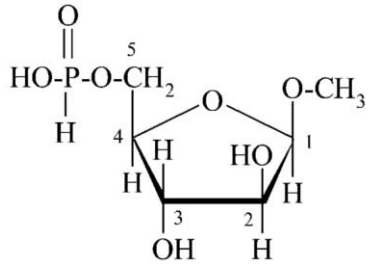
fosforan α-D-glukopiranozylu
1-fosforan α-D-glukopiranozy



6-fosforan D-glukopiranozy
6-*O*-fosfoniano-D-glukopiranoza



1,6-bis(fosforan) D-fruktofuranozy
1,6-di-*O*-fosfoniano-D-fruktofuranoza

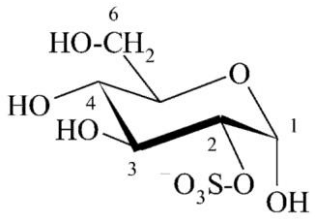


5-fosfonian wodoru (β-D-arabinofuranozydu metylu)
fosfonian wodoru 5-deoksy-β-D-arabinofuranozyd-5-ylu metylu

P-102.5.6.1.3 Estry kwasu siarkowego

Estry cukrów z kwasem siarkowym nazywa się dodając termin ‘siarczan’z odpowiednim lokantem przed nazwą cukru. Dla określenia *O*-pochodnej można stosować przedrostki ‘sulfo’ dla grupy $-SO_3H$ oraz ‘sulfoniano’ dla grup SO_3^-.

Przykład:



2-siarczan α-D-glukopiranozy
2-*O*-sulfoniano-α-D-glukopiranoza

P-102.5.6.2 Glikozydy

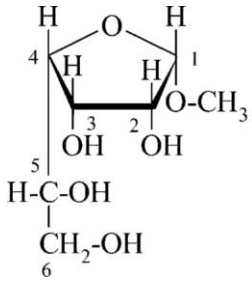
P-102.5.6.2.1 Definicje

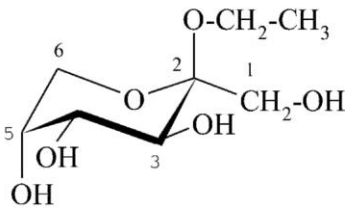
Glikoza jest terminem rzadziej używanym niż monosacharyd. Glikozydy to mieszane acetale (ketale) pochodzące z cyklicznych form monosacharydów, w których anomeryczna grupa –OH została zastąpiona przez –OR. Patrz również lit. 25 gdzie dokładnie omówiono użycie terminu ‘glikozydy’.

P-102.5.6.2.2 Nazwy

Glikozyd nazywa się nomenklaturą klasowo-funkcyjną. Nazwa klasy ‘glikozyd’ jest przystosowana do nazwy każdego cyklicznego monosacharydu przez zamianę końcowej litery ‘a’ na końcówkę ‘yd’ np. glukopiranoza na glukopiranozyd, fruktofuranoza na fruktofuranozyd. Nazwa klasy poprzedza nazwę, jako osobne słowo, podstawnika, który jest częścią grupy acetalowej lub ketalowej.

Przykłady:





α-D-gulofuranozyd metylu β-D-fruktopiranozyd etylu

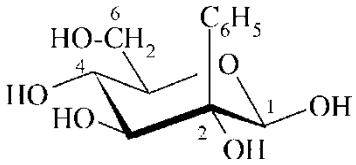
P-102.5.6.3 *C*-Podstawienie

P-102.5.6.3.1 Podstawienie atomu wodoru na nie terminalnym atomie węgla
P-102.5.6.3.2 Podstawienie z zamianą grupy hydroksylowej
P-102.5.6.3.3 Podstawienie na terminalnym atomie węgla

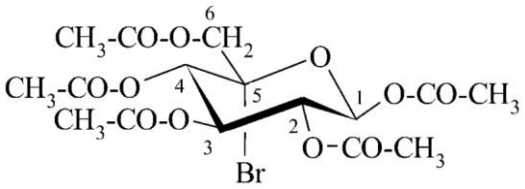
P-102.5.6.3.1 Podstawienie przy nie terminalnym atomie węgla

Podstawienie atomu wodoru na nieterminalnym atomie węgla prowadzi do *C*-podstawionego monosacharydu. W celu przypisania konfiguracji, grupę mającą pierwszeństwo według reguł pierwszeństwa CIP traktuje się jak równoważną grupie -OH. Każdej dwuznaczności (np. na atomie węgla, na którym utworzył się pierścień) można uniknąć stosując system *R/S* do przypisania konfiguracji zmodyfikowanemu centrum chiralności.

Przykłady:



2-*C*-fenylo-α-D-glukopiranoza
(2*R*,3*R*,4*S*,5*S*,6*R*)-6-(hydroksymetylo)-3-fenyloksano-2,3,4,5-tetraol

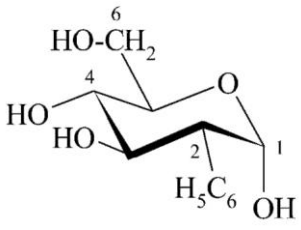


pentaoctan 5-*C*-bromo-β-D-glukopiranozy
tetraoctan (2*R*,3*R*,4*R*,5*S*,6*S*)-6-[(acetyloksy)metylo]-6-bromooksano-2,3,4,5-tetraylu

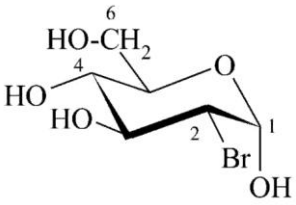
P-102.5.6.3.2 Podstawienie zastępujące nieterminalną grupę hydroksylową

Związek nazywa się jako podstawioną pochodną deoksycukru. Grupa zastępująca grupę -OH decyduje o przypisaniu konfiguracji. Każda potencjalna dwuznaczność powinna być eliminowana przez zastosowanie systemu *R/S*. System *R/S* powinien być stosowany w celu określenia konfiguracji w przypadku dwukrotnie podstawionych centrów chiralności; ta metoda jest preferowana względem określania konfiguracji przez przyjęcie, że podstawnik preferowany zgodnie z regułami pierwszeństwa CIP jest odpowiednikiem grupy -OH.

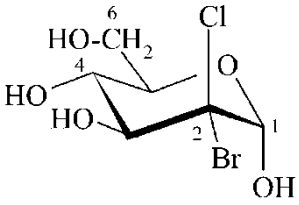
Przykłady:



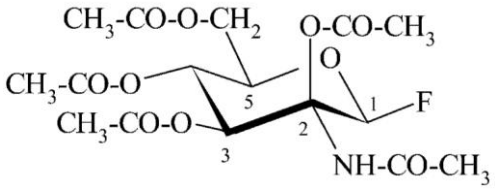
2-deoksy-2-fenylo-α-D-glukopiranoza
2-deoksy-2-*C*- fenylo-α-D-glukopiranoza
(2*R*)-2-deoksy-2- fenylo-α-D-*arabino*-heksopiranoza
(2*S*,3*R*,4*R*,5*S*,6*R*)-6-(hydroksymetylo)-3-fenylooksano-2,4,5-triol



2-bromo-2-deoksy-α-D-glukopiranoza



(2*R*)-2-bromo-2-chloro-2-deoksy-α-D-*arabino*-heksopiranoza
2-bromo-2-chloro-2-deoksy-α-D-glukopiranoza
(2*S*,3*R*,4*S*,5*S*,6*R*)-3-bromo-3-chloro-6-(hydroksymetylo)oksano-2,4,5-triol

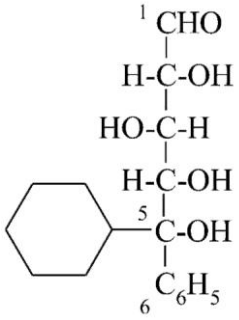


fluorek 2-*C*-acetamido-2,3,4,6-tetra-*O*-acetylo-α-D-mannopiranozylu
trioctan (2*S*,3*S*,4*S*,5*R*,6*R*)-3-acetamido-6-[(acetyloksy)metylo]-2-fluorooksano-3,4,5-triylu

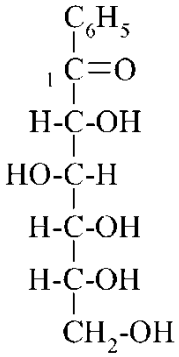
P-102.5.6.3.3 Podstawienie na terminalnym atomie węgla

Jeśli podstawienie na terminalnym atomie węgla węglowodanu tworzy nowe centrum chiralności, to jego konfiguracja powinna być określona przy zastosowaniu systemu *R/S*. Preferowane nazwy IUPAC tworzy się nomenklaturą podstawnikową.

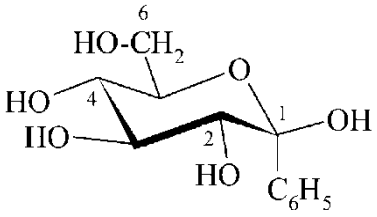
Przykłady:



(5*R*)-5-*C*-cykloheksylo-5-*C*-fenylo-D-ksyloza
(2*R*,3*S*,4*S*,5*R*)-cykloheksylo-2,3,4,5-tetrahydroksy-5-fenylopentanal



1-*C*-fenylo-D-glukoza
(2*R*,3*S*,4*R*,5*R*)-2,3,4,5,6-pentahydroksy-1-fenyloheksan-1-on



1-*C*-fenylo-β-D-glukopiranoza
(2*R*,3*R*,4*S*,5*S*,6*R*)-6-(hydroksymetylo)-2-fenylooksano-2,3,4,5-tetraol

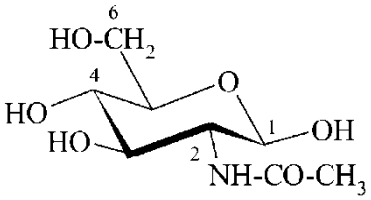
P-102.5.6.4 *N*-podstawienie

Podstawienie przy atomie azotu grupy $-NH_2$ aminocukru można traktować na dwa różne sposoby:

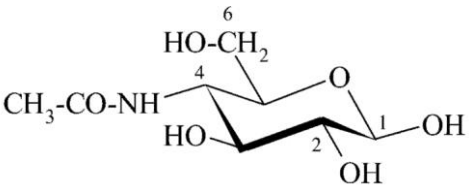
(1) Cała podstawiona grupa aminowa może być wyrażona w przedrostku, np.: 2-acetamido (lub 2-butyloamino)-2-deoksy-D-glukoza.

(2) Jeśli aminocukier ma nazwę zwyczajową, to podstawienie wskazuje się przedrostkiem poprzedzanym przez, pisaną kursywą, wielką literą *N*.

Przykłady:



2-acetamido-2-deoksy-β-D-glukopiranoza
N-acetylo-β-D-glukozamina



4-acetamido-4-deoksy-β-D-glukopiranoza

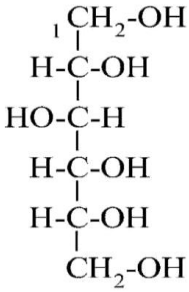
P-102.5.6.5 Alditole

Alditole nazywa się zmieniając końcówki '-oza' w nazwie odpowiedniej aldozy na '-itol'.

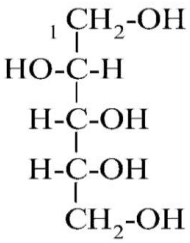
P-102.5.6.5.1 Wybór struktury macierzystej

Jeśli ten sam alditol może się wywodzić z dwóch różnych aldoz lub aldozy oraz ketozy, to zalecaną strukturę wskazuje reguła P-102.4. Wyjątkiem są zachowane nazwy fukitol i ramnitol dopuszczalne dla alditoli odpowiadających 6-deoksycukrom: fukozie i ramnozie.

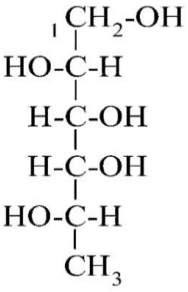
Przykłady:



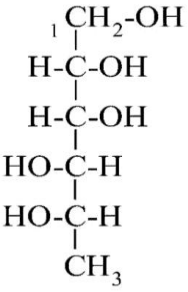
D-glucitol
(nie L-gulitol)



D-arabinitol
(nie D-liksitol)



L-fukitol
1-deoksy-D-galaktitol

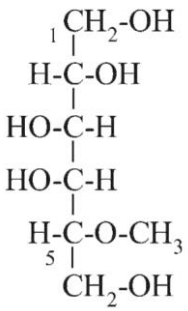


L-ramnitol
1-deoksy-L-mannitol

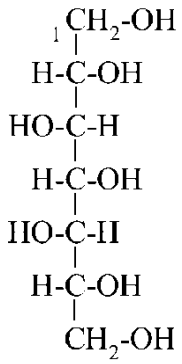
P-102.5.6.5.2 Formy *mezo*

Przedrostek '*mezo*-' musi być dołączony do preferowanych nazw: erytrytol, galaktitol i rybitol. Stereodeskryptor 'D' lub 'L' trzeba podać, gdy pochodna izomeru *mezo* staje się asymetryczna w wyniku podstawienia. Stereodeskryptor 'D' lub 'L' należy dodać również wtedy, jeśli występują więcej niż cztery następujące po sobie centra chiralności.

Przykłady:



5-*O*-metylo- D-galaktitol
(konfiguracja ' D' jest starsza od 'L'
patrz P-102.4)



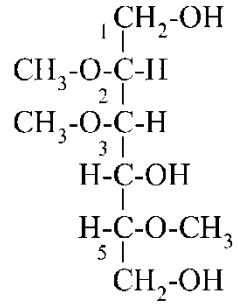
mezo-D-*glicero*-L-*ido*-heptitol
(konfiguracja 'D' jest starsza od 'L' patrz P-102.4)
(2*R*,3*S*,4*r*,5*R*,6*S*)-heptano-1,2,3,4,5,6,7-heptaol

P-102.5.6.5.3 Wybór macierzystej struktury dla podstawionych alditoli

Macierzysta struktura musi zawierać:

(a) najniższe lokanty dla przedrostków podstawników zgodnie z kryterium (e) w regule P-102.4.

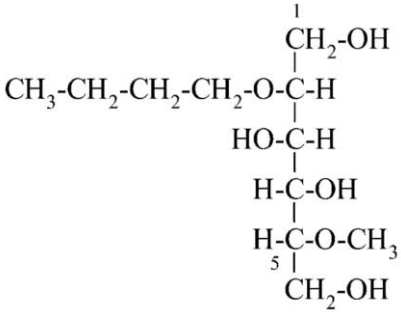
Przykład:



2,3,5-tri-*O*-metylo-D-mannitol
(nie 2,4,5-tri-*O*-metylo-D-mannitol)

(b) najniższy lokant dla podstawnika wymienianego jako pierwszy w porządku alfabetycznym, zgodnie z kryterium (f) w regule P-102.4.

Przykład:

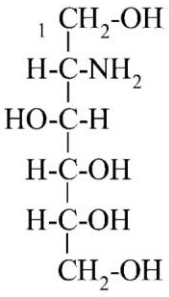


2-*O*-butylo-5-*O*-metylo-D-mannitol
(nie 5-*O*-butylo-2-*O*-metylo-D-mannitol)

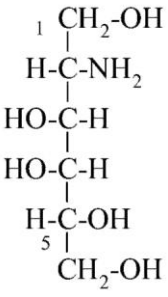
P-102.5.6.5.4 Aminoalditole

Alditole wywodzące się z galaktozoaminy i glukozoaminy to aminoalditole. Mają zachowane nazwy, odpowiednio, galaktozoaminitol i glukozoaminitol.

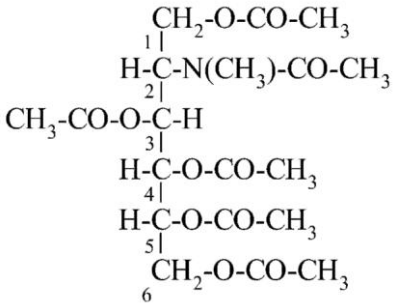
Przykłady:



D-glukozoaminitol
2-amino-2-deoksy-D-glukitol



D-galaktozoaminitol
2-amino-2-deoksy-D-galaktitol



1,3,4,5,6-pentaoctan 2-deoksy-2-(*N*-metyloacetamido)- D-glucitolu

P-102.5.6.6 Kwasy karboksylowe monosacharydów

P-102.5.6.6.1 Klasyfikacja

P-102.5.6.6.2 Kwasy aldonowe. Kwasy monokarboksylowe formalnie powstające z aldoz w wyniku utlenienia grupy aldehydowej do grupy karboksylowej nazywa się kwasami aldonowymi.

P-102.5.6.6.3 Kwasy ketoaldonowe. Kwasy oksokarboksylowe formalnie powstające z kwasów aldonowych przez utlenienie drugorzędowej grupy >CHOH do grupy karbonylowej nazywa się kwasami ketoaldonowymi.

P-102.5.6.6.4 Kwasy uronowe. Kwasy monokarboksylowe formalnie powstające z aldoz przez utlenienie terminalnej grupy $–CH_2OH$ do grupy karboksylowej nazywa się kwasami uronowymi.

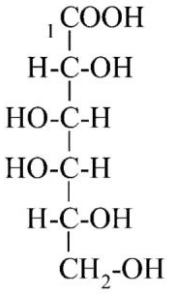
P-102.5.6.6.5 Kwasy aldarowe. Kwasy dikarboksylowe tworzone z aldoz przez utlenienie obu grup końcowych (–CHO i $-CH_2OH$) do grup karboksylowych nazywa się kwasami aldarowymi.

P-102.5.6.6.2 Kwasy aldonowe

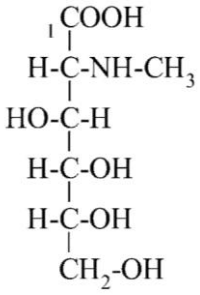
Kwasy aldonowe dzielą się na aldotrionowe, aldotetronowe, aldopentonowe, aldoheksonowe itd., zależnie od liczby atomów węgla w łańcuchu. Nazwy poszczególnych związków tworzy się

zastępując końcówkę ‘oza’w zachowanej lub systematycznej nazwie aldozy na końcówkę ‘onowy’ i poprzedzając nazwę słowem ‘kwas’. Lokant 1 jest przypisany do atomu węgla grupy karboksylowej.

Przykłady:



kwas D-galaktonowy

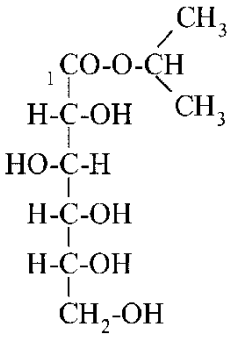


kwas 2-deoksy-2-(metyloamino)-D-glukonowy

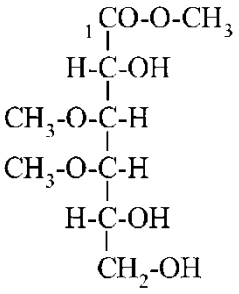
P-102.5.6.6.2.1 Pochodne kwasów aldonowych

Kwasy aldonowe traktuje się jako kwasy karboksylowe mające zachowaną nazwę. Mogą tworzyć sole, estry, bezwodniki, grupy acylowe, halogenki i pseudohalogenki kwasowe, amidy, hydrazydy, nitryle i chalkogenowe analogi, jak opisano w P-65 i P-66 dotyczących systematycznej nomenklatury.

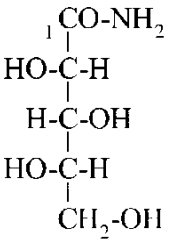
Przykłady:



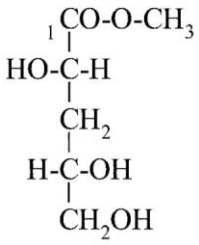
D-glukonian propan-2-ylu



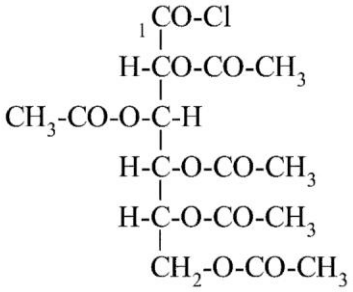
3,4-di-*O*-metylo-D-galaktonian metylu



L-ksylonoamid



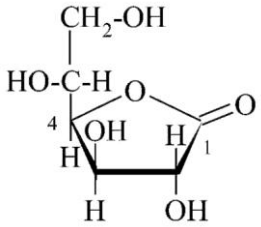
3-deoksy-D-*treo*-pentonian metylu



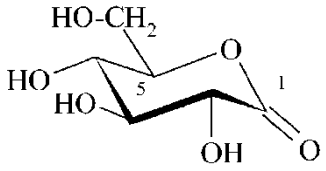
chlorek penta-*O*-acetylo-D-glukonoilu

P-102.5.6.6.2.2 Laktony i laktamy nazywa się zgodnie z regułami, odpowiednio, P-65.6.3.5.1 i P-66.1.4.1. Przed terminem ‘lakton’ lub ‘laktam’ występują dwa lokanty: pierwszy jest lokantem 1określającym pozycję grupy karboksy, a drugi lokant wskazuje pozycję przyłączenia do węglowego łańcucha. Do nazwania laktamów grupa aminowa, $-NH_2$ musi być wytworzona i wymieniona. Nie zaleca się używanie greckich liter do określenia rozmiarów pierścienia laktonu lub laktamu. Nazwy mogą być również tworzone podstawnikowo na bazie pierścieni heterocyklicznych zgodnie z regułami opisanymi w rozdziałach P-1 do P-9.

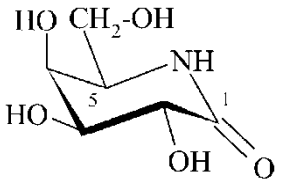
Przykłady:



D-glukono-1,4-lakton
(3*R*,4*R*,5*R*)-[(1*R*)-1,2-dihydroksyetylo]-3,4-dihydroksyoksolan-2-on



D-glukono-1,5-lakton
(3*R*,4*S*,5*S*,6*R*)-3,4,5-trihydroksy-6-(hydroksymetylo)oksan-2-on

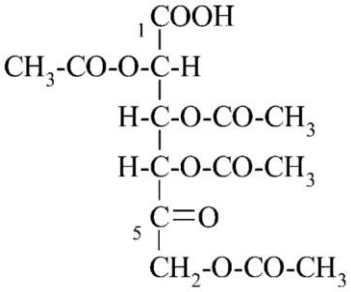


5-amino-5-deoksy-D-galaktono-1,5-laktam
(3*R*,4*S*,5*S*,6*R*)-3,4,5-trihydroksy-6-(hydroksymetylo)piperydyn-2-on

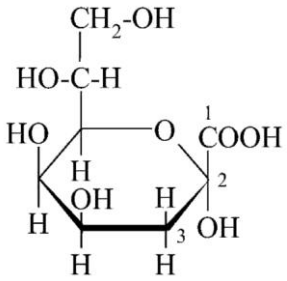
P-102.5.6.6.3 Kwasy ketoaldonowe

P-102.5.6.6.3.1 Nazwy poszczególnych kwasów ketoaldonowych tworzy się zastępując końcówkę ‘uloza’ odpowiedniej ketozy końcówką ‘ulozonowy’, poprzedzoną przez lokant grupy ketonowej. Numeracja rozpoczyna się od węgla grupy karboksylowej.

Przykłady:



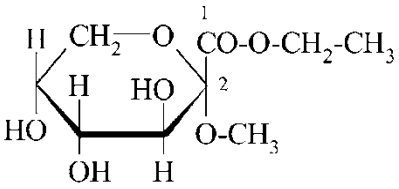
kwas 2,3,4,6-tetra-*O*-acetylo-D-arabino-heks-5-ulozonowy
kwas (2*S*,3*R*,4*S*)-2,3,4,6-tetrakis(acetyloksy)-5-oksoheksanowy



kwas 3-deoksy-α-D-*manno*-okt-2-ulopiranozowy
kwas (2*R*,4*R*,5*R*,6*R*)-6-[(1*R*)-1,2-dihydroksyetylo]-2,4,5-trihydroksyoksano-2-karboksylowy

P-102.5.6.6.3.2 Glikozydy kwasów ketoaldonowych nazywa się zamieniając w nazwie składnika ‘piranoza’ na ‘piranozyd’ co daje ‘kwas –ulopiranozydonowy’. Nazwy pochodnych kwasów ketoaldonowych tworz się analogicznie jak opisano w rozdziale P-102.5.6.6.2 dla kwasów aldonowych. Kiedy glikozyd jest zestryfikowany, glikozydową część nazwy ujmuje się w nawias.

Przykład:

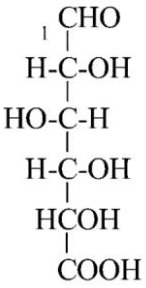


(α-D-fruktopiranozyd metylu)onian etylu (PIN)
(α-D-*arabino*-heks-2-ulopiranozyd metylu)onian etylu
(2*R*,3*S*,4*R*,5*R*)-3,4,5-trihydroksy-2-metoksyoksano-2-karboksylan etylu

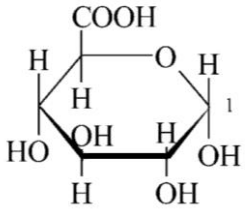
P-102.5.6.6.4 Kwasy uronowe

P-102.5.6.6.4.1 Nazwy poszczególnych kwasów uronowych tworzy się zastępując końcówkę ‘za’ w zachowanej lub systematycznej nazwie odpowiedniej aldozy końcówką ‘-uronowy’ i dodając na początku nazwy osobne słowo ‘kwas’. Numeracja aldozy pozostaje niezmieniona; lokant ‘1’ jest w dalszym ciągu przypisany do grupy (potencjalnie) aldehydowej.

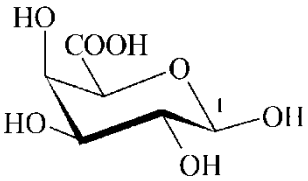
Przykłady:



kwas D-glukouronowy



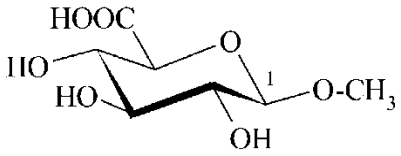
kwas α-D-glukopiranouronowy



kwas β-D-galaktopiranouronowy

P-102.5.6.6.4.2 Nazwy glikozydów kwasów uronowych tworzy się zastępując składnik ‘piran' w nazwie kwasu na ‘piranozyd’ .

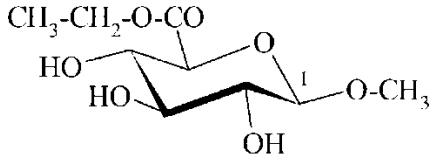
Przykład:



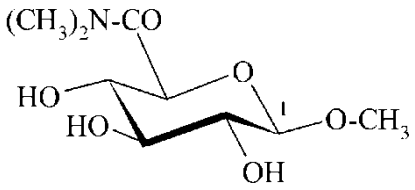
kwas (β-D-glukopiranozyd metylu)uronowy

P-102.5.6.6.4.3 Pochodne kwasów uronowych nazywa się zgodnie z wytycznymi przedstawionymi P-102, P-65 i P-66.

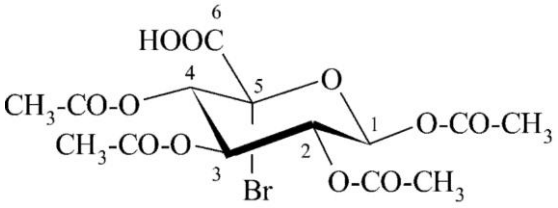
Przykłady:



(β-D-glukopiranozyd metylu)uronian etylu



N,*N*-dimetylo((β-D-glukopiranozyd metylu)uronoamid



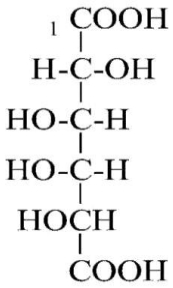
kwas (5*R*)-1,2,3,4-tetra-*O*-acetylo-5-*C*-bromo-α-D-*ksylo*-heksapiranouronowy
kwas (2*R*,3*S*,4*R*,5*R*,6*R*)-3,4,5,6-tetrakis(acetoksy)-2-bromooksano-2-karboksylowy

P-102.5.6.6.5 Kwasy aldarowe

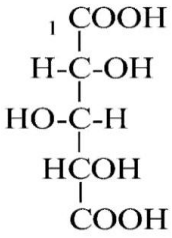
P-102.5.6.6.5.1 Nazwy poszczególnych kwasów aldarowych tworzy się zastępując końcówkę ‘oza’ w nazwie macierzystej aldozy końcówką ‘arowy’, i umieszczając na początku nazwy słowo ‘kwas’. Wybór struktury macierzystej opiera się na regułach omówionych w P-102.4 i P-102.5.6.5.1.

Do nazw kwasów aldarowych, które są symetryczne i z tego powodu nie mają przedrostków D lub L, dla jasności należy dodać stereodeskryptor '*mezo*-'. Należy jednak dodać przedrostek D lub L, gdy kwas *mezo*-aldarowy staje się asymetryczny w wyniku podstawienia.

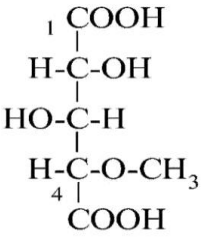
Przykłady:



kwas L-altrarowy
(nie L-talarowy)



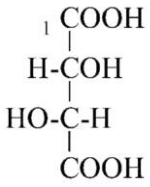
kwas *mezo*-ksylarowy



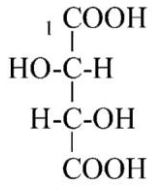
kwas 4-*O*-metylo-D-ksylarow
(nie 2-*O*-metylo-ksylarowy)

P-102.5.6.6.5.2 Kwas winowy jest nazwą zwyczajową kwasów aldarowych, odpowiadających macierzystym aldozom, erytrozie i treozie. Konfiguracje kwasu winowego podaje się w systemie ‘*R*’ i ‘*S*’. Sole estry nazywa się winianami.

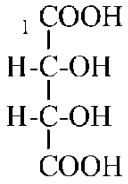
Przykłady:



kwas (2*R*,3*R*)-2,3-dihydroksybutanodiowy
kwas (2*R*,3*R*)-winowy
kwas L-trearowy
kwas (+)-winowy



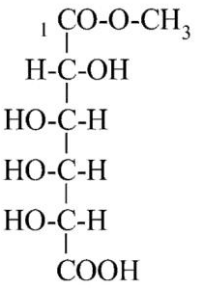
kwas (2*S*,3*S*)-2,3-dihydroksybutanodiowy
kwas (2*S*,3*S*)-winowy
kwas D-trearowy
kwas (-)-winowy



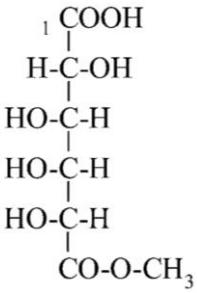
kwas (2*R*,3*S*)-2,3-dihydroksybutanodiowy
kwas (2*R*,3*S*)-winowy
kwas erytrarowy
kwas *mezo*-winowy

P-102.5.6.6.5.3 Pochodne kwasów aldarowych otrzymane przez modyfikację grupy karboksylowej (estry, amidy, hydrazydy, nitryle, kwasy amowe, etc.) nazywa się zgodnie z zasadami przedstawionymi w P-102.5.6.6.2 i P-66.

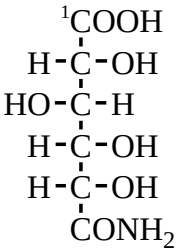
Przykłady:



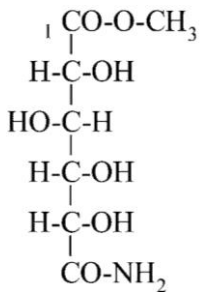
L-altraran wodoru 1-metylu



L-altraran wodoru 6-metylu



kwas D-glukar-6-amowy
kwas 6-amino-6-deoksy-6-okso-D-glukonowy



D-glukar-6-amian metylu
6-amino-6-deoksy-6-okso-glukonian metylu

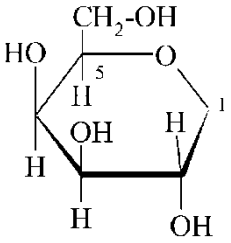
P-102.5.6.7 Anhydrydy

Anhydrydy są to inter- (wewnątrz-) i intramolekularne (międzycząsteczkowe) pochodne monosacharydów.

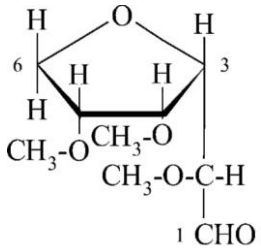
P-102.5.6.7.1 Intramolekularne anhydrydy.

Wewnątrzcząsteczkowe etery (potocznie nazywane wewnątrzcząsteczkowymi bezwodnikami), formalnie powstają przez eliminację wody z dwóch grup hydroksylowych jednej cząsteczki monosacharydu (aldozy lub ketozy) lub pochodnej monosacharydu. Związki te nazywa się dodając do nazwy monosacharydu rozłączny przedrostek ‘anhydro’ poprzedzony parą lokantów wskazujących dwie grupy hydroksylowe.

Przykłady:



1,5-anhydro-D-galaktitol
(2*R*,3*R*,4*R*,5*S*)-2-(hydroksymetylo)oksano-3,4,5-triol

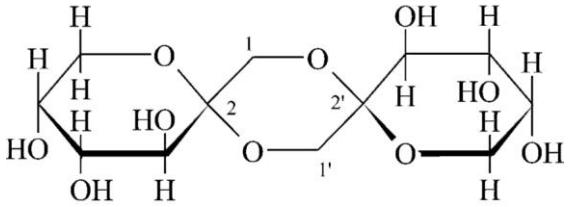


3,6-anhydro-2,4,5-tri-*O*-metylo-D-glukoza
(2*R*)-2-[(2*S*,3*R*,4*R*)-3,4-dimetoksyoksolan-2-ylo]-2-metoksyacetaldehyd

P-102.5.6.7.2 Intermolekularne anhydrydy

Cykliczne produkty kondensacji dwóch cząsteczek monosacharydów z wydzieleniem dwóch cząsteczek wody (zwykle nazywane bezwodnikami międzycząsteczkowymi) nazywa się, umieszczając termin ‘dianhydryd’ przed nazwami dwóch macierzystych monosacharydów. Jeśli monosacharydy są różne, to jako pierwszy wymienia się starszy według kryteriów wyboru macierzystej struktury (patrz P-102.4). Położenie każdego wiązania bezwodnikowego wskazuje się parą lokantów wskazujących położenie uczestniczących grup; lokanty odnoszące się do jednego z monosacharydów (w mieszanych bezwodnikach wymieniane jako drugie) są primowane. Obie pary lokantów bezpośrednio poprzedzają termin ‘dianhydryd’.

Przykład:



1,2′:1′,2-dianhydryd α-D-fruktopiranozy β-D-fruktopiranozy

[α-D-fruktopiranoza jest wymieniana jako pierwsza zgodnie z P-102.4©, α poprzedza β] (3*R*,4*R*,5*S*,6*R*,9*S*,12*R*,13*R*,14*S*)-1,7,10,15-tetraoksadispiro[5.2.5^{9}.2^{6}]heksadekano-3,4,5,12,13,14-heksaol

P-102.6 MONOSACHARYDY I ICH POCHODNE JAKO PODSTAWNIKI

P-102.6.1 Grupy glikozylowe
P-102.6.2 Podstawniki inne niż grupy glikozylowe

P-102.6.1 Grupy glikozylowe

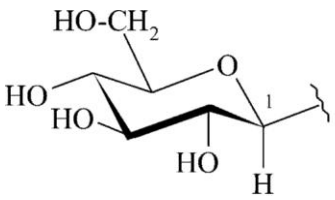
P-102.6.1.1 Grupy glikozylowe
P-102.6.1.2 Związki *O*-glikozylowe
P-102.6.1.3 Związki *N*-glikozylowe (glikozyloaminy)
P-102.6.1.4 Związki *C*-glikozylowe
P-102.6.1.5 Halogenki, pseudohalogenki i estry glikozylowe

P-102.6.1.1 Grupy glikozylowe

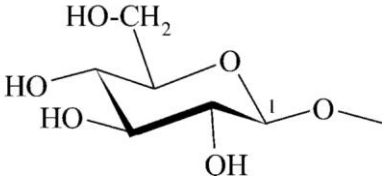
P-102.6.1.1.1 Podstawniki powstające w wyniku usunięcia anomerycznej grupy hydroksylowej z cyklicznych monosacharydów nazywa się zastępując końcową literę ‘a’ w nazwie monosacharydu przez ‘yl’. W nomenklaturze węglowodanów stosuje się termin ‘reszta glikozylowa’. Terminy tego typu są szeroko stosowane w nazywaniu glikozydów, jeśli nie są one strukturami macierzystymi, oraz oligosacharydów.

Do nazwy podstawnika powstałego przez usunięcie grupy hydroksylowej z pozycji anomerycznej nie dodajemy lokantu wskazującego pozycję wolnej walencyjności. W nomenklaturze systematycznej zaleca się stosowanie falistej lini w celu zaznaczenia wolnej wartościowości w cyklicznym podstawniku.

Przykłady:



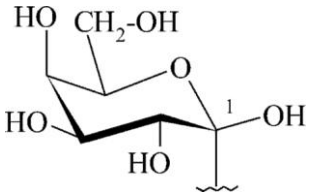
β-D-glukopiranozyl
(pokazany jest atom wodoru w pozycji 1)



β-D-glukopiranozyloksy

P-102.6.1.1.2 Kiedy wolna walencyjność jest tworzona poprzez utratę atomu wodoru na węglu ‘1’ podstawnik nazywa się jako grupę glikozylową, a obecność grupy hydroksylowej wskazuje się przez podstawienie na węglu ‘1’. W takim przypadku stereodeskryptory ‘α’ lub ‘β’ odnoszą się do wolnej walencyjności a nie do grupy hydroksylowej.

Przykład:

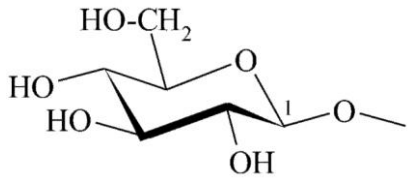


1-hydroksy-α-D-galaktopiranozyl

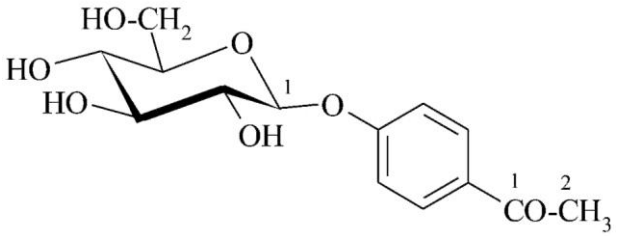
P-102.6.1.2 Związki *O*-glikozylowe

Podstawnik utworzone w wyniku usunięcia atomu wodoru z anomerycznej grupy -OH traktuje się jako zespolony podstawnik powstały z grupy ‘glikozyl’ i grupy 'oksy'. W poniższych przykładach nazwy związków tworzy się z zastosowaniem starszeństwa klas do ustalenia głównej grupy charakterystycznej i przypisania jej monosacharydowemu lub aglikonowemu składnikowi.

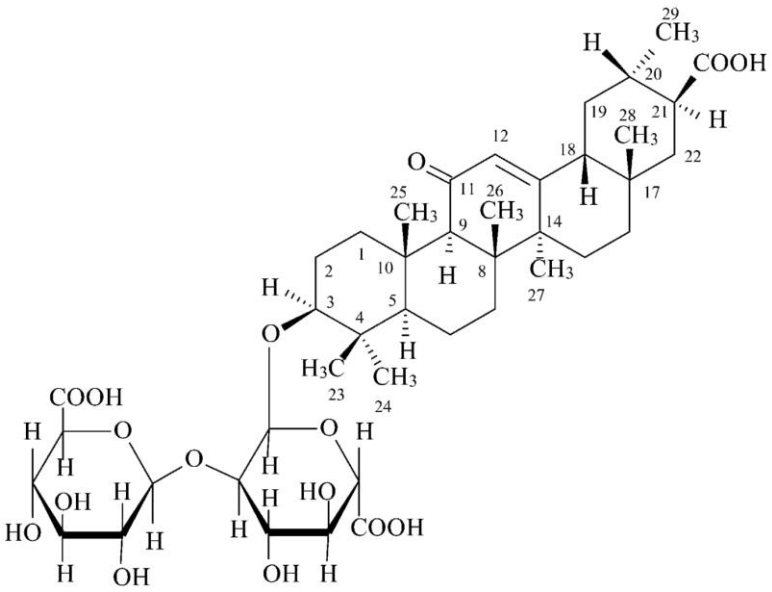
Przykłady:



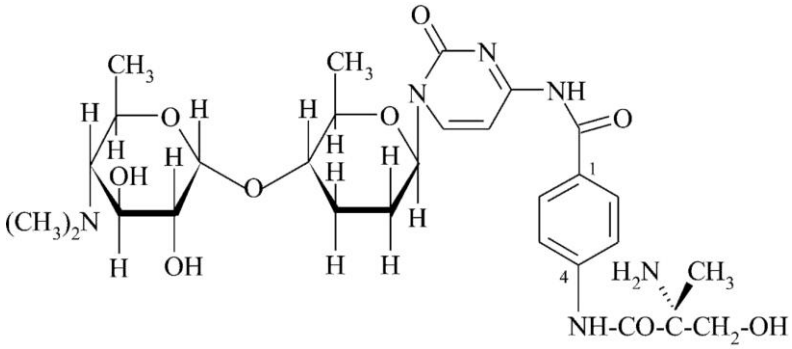
β-D-glukopiranozyloksy



1-[4-(β-D-glukopiranozyloksy)fenylo]etan-1-on
nie 4′-(β-D-glukopiranozyloksy)acetofenon; acetofenon
nie może być podstawiony (patrz P-64.2.2.1)
(również nie β-D-glukopiranozyd 4-acetylofenylu; keton jest starszy od związku hydroksylowego)



kwas 21β-karboksy-11-okso-30-norolean-12-en-3β-ylo-(kwas 2-*O*-β-D-glukopiranozylouronowy)-α-D-glukopirazydouronowy



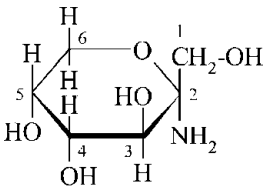
4-[(2*R*)-2-amino-3-hydroksy-2-metylopropanoamido]-*N*-{1-[(2*R*,5*S*,6*R*)-5-{[4,6-dideoksy-4-(dimetyloamino)-α-D-glukopiranozyl]oksy}-6-metyloksan-2-ylo]-2-okso-1,2-dihydropirymidyn--4-ylo}benzamid

Wytłumaczenie: główną funkcją jest amid; cykliczny amid, benzamid jest starszy od acyklicznego propanoamidu.

P-102.6.1.3 Związki *N*-glikozylowe (glikozyloaminy)

Pochodne *N*-glikozylowe nazywane są glikozyloaminami.

Przykład:

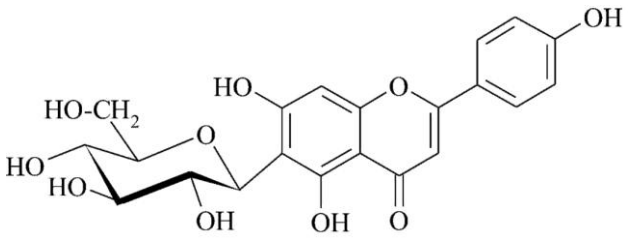


α-D-fruktopiranozoiloamina

P-102.6.1.4 Związki *C*-glikozylowe

Związki, formalnie powstające przez eliminację cząsteczki wody utworzonej z glikozydowej (anomerycznej) grupy hydroksylowej i atomu wodoru związanego z atomem węgla (co prowadzi do utworzenia wiązania C-C), nazywa się stosując nazwę odpowiedniej grupy glikozylowej.

Przykład:

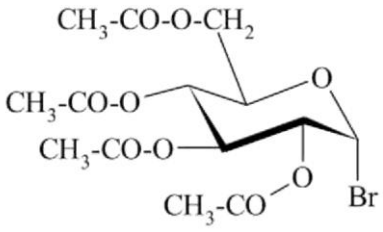


6-(β-D-glukopiranozylo)-5,7-dihydroksy-2-(4-hydroksyfenylo)-4*H*-chromen-4-on
6-(β-D-glukopiranozylo)-5,7-dihydroksy-2-(4-hydroksyfenylo)-4*H*-1-benzopiran-4-on
6-(β-D-glukopiranozylo)-4′,5,7-dihydroksyflawon

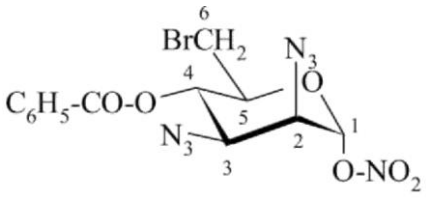
P-102.6.1.5 Halogenki, pseudohalogenki i estry glikozylowe

Nazwy halogenków i pseudohalogenków glikozylowych tworzy się stosując nomenklaturę klasowo-funkcyjną, czyli pododaje się nazwę klasy np.: chlorek, izocyjanian itp., zapisując ją jako oddzielny wyraz przed nazwą właściwej grupy glikozylowej. Estry oksokwasów w pozycji 1 traktuje się w sposób opisany dla estrów w innych pozycjach (patrz P-102.5.6.1).

Przykłady:



bromek 2,3,4,6-tetra-*O*-acetylo-α-D-glukopiranozylu

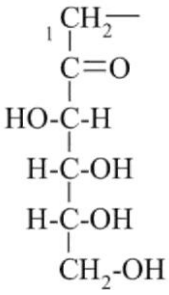


1-azotan 4-benzoesan 2,3-diazydo-6-bromo-2,3,6-trideoksy-α-D-mannopiranozy

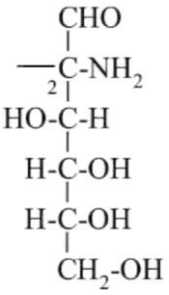
P-102.6.2 Podstawniki inne niż grupy glikozylowe

Atom wodoru może być usunięty z każdej pozycji w monosacharydzie innej niż C-1. Takie utworzenie wolnej walencyjności zaznacza się przyrostkiem ‘yl’, poprzedzonym odpowiednim lokantem wskazującym pozycję wolnej walencyjności i odróżnienia od podstawnika glikozylowego, dla którego pomija się lokant ‘1’. Takie przyrostki tworzy się zastępując literę ‘a’ w systematycznej lub zwyczajowej nazwie monosacharydu końcówką *n-C*-yl, *n-O*-yl. Symbol ‘*C*’ pomija się wtedy, gdy wolna walencyjność jest tworzona na atomie węgla do którego przyłączone są tylko atomy wodoru.

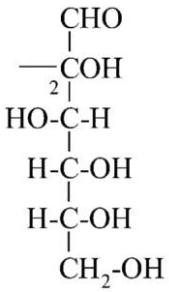
Przykłady:



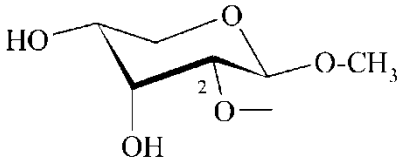
1-deoksy-D-fruktoz-1-yl



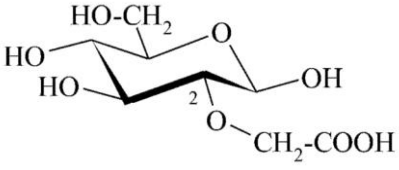
2-amino-2-deoksy-D-glukoz-2-*C*-yl



D-glukoz-2-*C*-yl



β-D-rybopiranozyd-2-*O*-yl metylu



kwas (β-D-glukopiranozyl-2-*O*-ylo)octowy
(nie 2-*O*-(karboksymetylo)-β- D-glukopiranoza; ta nazwa jest niezgodna z wymogami opisanymi w P-102.6.1.2; kwas karboksylowy jest starszy od związku hydroksylowego)

P-102.7 DISACHARYDY I OLIGOSACHARYDY

Nazwy disacharydów i oligosacharydów tworzy się według reguł i konwencji opisanych wcześniej dla monosacharydów.

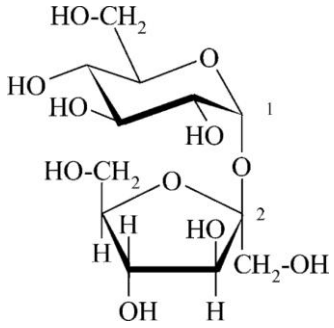
P-102.7.1 Disacharydy
P-102.7.2 Oligosacharydy

P-102.7.1 Disacharydy

P-102.7.1.1 Disacharydy bez wolnej grupy hemiacetalowej

Disacharydy utworzone w wyniku eliminacji cząsteczki wody z dwóch anomerycznych grup hydroksylowych, nazywane są glikozyloglikozydami. Macierzysta struktura (cytowana jako ‘glikozyd’) jest wybrana zgodnie z kryteriami opisanymi w P-102.4. Oba anomeryczne deskryptory muszą być wymienione w nazwie.

Przykład:



α-D-glukopiranozyd β-D-fruktofuranozylu
(nie β-D-fruktofuranozyd α-D-glukopiranozylu, frukto wyprzedza gluko w kolejności alfabetycznej)
sacharoza (nazwa zwyczajowa)

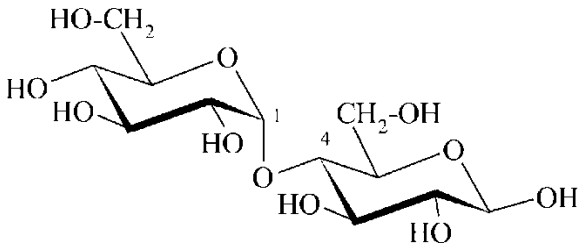
P-102.7.1.2 Disacharydy z wolną grupą hemiacetalową

Disacharydy powstające w wyniku eliminacji jednej cząsteczki wody z jednej glikozydowej (anomerycznej) grupy hydroksylowej i jednej alkoholowej grupy hydroksylowej nazywa się glikozyloglikozami. W pełnej nazwie lokanty i deskryptory anomeryczne muszą być wymienione.

Są dwie ustalone metody wymieniania lokantów:

(1) w nawiasach pomiędzy składnikami ze strzałką od lokantu glikozylowego składnika do lokantu glikozowego składnika.
(2) przed glikozylowym składnikiem.

Przykład:



(1) α-D-glukopiranozylo-(1→4)-β-D-glukopiranoza
(2) 4-*O*-α-D-glukopiranozylo-β-D-glukopiranoza
β-maltoza (nazwa zwyczajowa; nie β-D-maltoza)

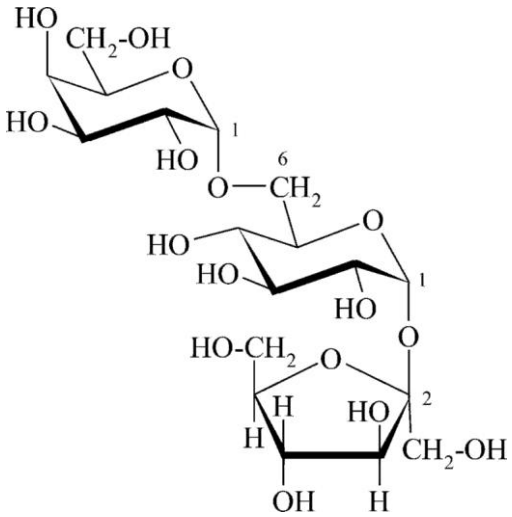
P-102.7.2 Oligosacharydy

Oligosacharydy są wieloskładnikowymi cukrami z co najmniej trzema jednostkami monosacharydowymi. W zależności od liczby składowych, nazywane są trisacharydami, tetrasacharydami, itd. Nie ma zdefiniowanej liczby jednostek, od której zalicza się dany cukier do polisacharydów.

P-102.7.2.1 Oligosacharydy bez wolnej grupy hemiacetalowej

Trisacharyd nazywa się glikozydem glikozyloglikozylu lub glikozyloglikozydem glikozylu. Wyboru, która z dwu reszt połączonych przez ich anomeryczne wiązania będzie wymieniana jako ‘glikozyd’, dokonuje się na podstawie reguł zawartych w P-102.4. Alternatywą jest sekwencyjne (od końca do końca) podejście do nazywania niezależne od P-102.4. Nazwa jest tworzona preferowaną metodą nazywania disacharydów.

Przykład:

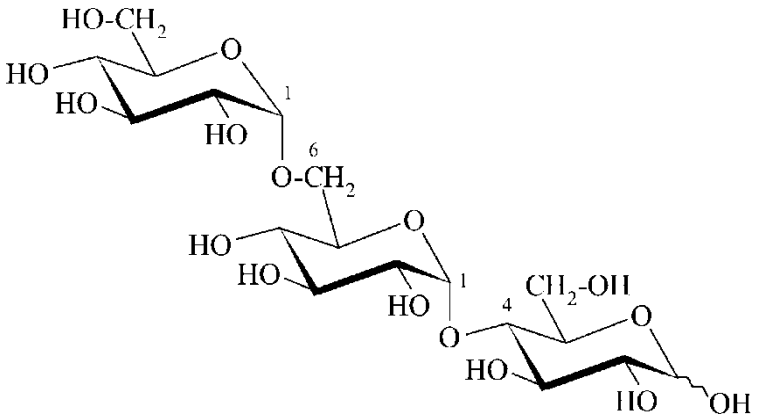


α-D-galaktopiranozylo-(1→6)-α-D-glukopiranozyd β-D-fruktofuranozylu
(jako ‘glikozyd’ wybrana jest glukoza nie fruktoza)
β-D-fruktofuranozyd α-D-galaktopiranozylo-(1→6)-α-D-glukopiranozylu
(metoda sekwencyjna)
rafinoza (nazwa zwyczajowa)

P-102.7.2.2 Oligosacharydy z wolną grupą hemiacetalową

Oligosacharyd tego rodzaju ma nazwę glikozylo-[glikozylo]$_n$-glikoza, gdzie część ‘glikoza’ jest strukturą macierzystą. Konwencjonalny wzór ma resztę glikozy po stronie prawej. Nazwy tworzy się jak opisano w rozdziale P-102.7.2.1.

Przykład:



α-D-glukopiranozylo-(1→6)-α-D-glukopiranozylo-(1→4)- D-glukopiranoza
panoza (nazwa zwyczajowa)

P-103 AMINOKWASY I PEPTYDY

P-103.0 Wprowadzenie
P-103.1 Nazwy, numerowanie i określanie konfiguracji aminokwasów
P-103.2 Pochodne aminokwasów
P-103.3 Nomenklatura peptydów

P-103.0 WPROWADZENIE

Ta sekcja opisuje nomenklaturę aminokwasów stanowiących bloki budulcowe peptydów i białek. Są one funkcyjnymi związkami macierzystymi z nazwami zachowanymi i wymienionymi w Tabeli 10.4. Mniej rozpowszechnione aminokwasy również mają swoje zachowane nazwy (patrz Tabela 10.5).Nomenklatura aminokwasów składa się z dwóch rodzajów nazw: nazw opartych na nazwach zachowanych dla funkcyjnych związków macierzystych z ograniczoną zdolnością do funkcjonalizacji i podstawienia oraz systematycznych nazwach podstawnikowych dla wszystkich innych związków.

Nomenklatura tych aminokwasów i peptydów opisana jest w dokumencie zatytułowanym ‘Nomenklatura i Symbole Aminokwasów i Peptydów’ (lit. 27). Natomiast dokument obejmujący nomenklaturę cyklicznych peptydów jest obecnie w przygotowaniu. W tej sekcji, nomenklatura tych aminokwasów i peptydów jest ograniczona do ich pochodnych spoza grupy peptydów i białek.

P-103.1 NAZWY, NUMERACJA I OKREŚLANIE KONFIGURACJI AMINOKWASÓW

P-103.1.1 Nazwy zachowane i systematyczne
P-103.1.2 Numerowanie kwasów α-aminokarboksylowych
P-103.1.3 Konfiguracja kwasów α-aminokarboksylowych

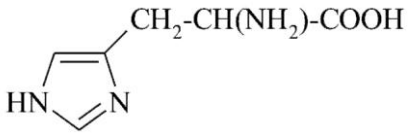
P-103.1.1 Nazwy zachowane i systematyczne

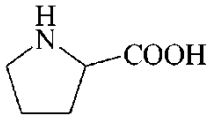
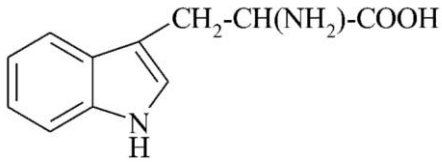
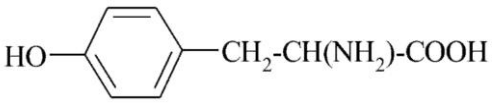
P-103.1.1.1 Zachowane nazwy ‘pospolitych’ aminokwasów
P-103.1.1.2 Zachowane nazwy ‘mniej pospolitych’ aminokwasów
P-103.1.1.3 Systematyczne nazwy podstawnikowe

P-103.1.1.1 Zachowane nazwy ‘pospolitych’ aminokwasów

Zachowane nazwy α-aminokwasów, które są powszechnie spotykane w białkach i występują w kodzie genetycznym, wraz z ich systematycznymi nazwami, symbolami (3- literowymi i/lub 1-literowymi) i wzorami, podane są w Tabeli 10.4. Niektóre mniej rozpowszechnione aminokwasy zostały omówione w P-103.1.1.2 i wymienione w Tabeli 10.5.

Tabela 10.4 Zachowane nazwy ‘pospolitych’ α-aminokwasów

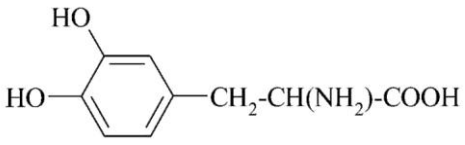
Zachowana nazwa **Nazwa systematyczna**	**Symbole** **3-liter.**	**1-liter.**	**Wzór**
alanina kwas 2-aminopropanowy	Ala	A	CH_3-CH(NH_2)-COOH
arginina kwas 2-amino-5-karbaimidoamido-pentanowy	Arg	R	H_2N-C(=NH)-NH-[CH_2]$_3$-CH(NH_2)-COOH
asparagina kwas 2,4-diamino-4-oksobutanowy	Asn	N	H_2N-CO-CH_2-CH(NH_2)-COOH
kwas asparaginowy kwas 2-aminobutanodiowy	Asp	D	HOOC-CH_2-CH(NH_2)-COOH
cysteina kwas 2-amino-3-tiolopropanowy	Cys	C	HS-CH_2-CH(NH_2)-COOH
glutamina kwas 2,5-diamino-5-oksopentanowy	Gln	Q	H_2N-CO-[CH_2]$_2$-CH(NH_2)-COOH
kwas glutaminowy kwas 2-aminopentanodiowy	Glu	E	HOOC-[CH_2]$_2$-CH(NH_2)-COOH
glicyna kwas aminooctowy	Gly	G	H_2N-CH_2-COOH
histydyna kwas 2-amino-3-(1*H*-imidazolo-4-ylo)propanowy	His	H	
izoleucyna kwas (2*S*,3*S*)-2-amino-3-metylo-pentanowy (oznaczenie konfiguracji patrz P-103.1.3.2.2)	Ile	I	CH_3-CH_2-CH(CH_3)-CH(NH_2)-COOH

leucyna kwas 2-amino-4-metylopentanowy	Leu	L	$(CH_3)_2CH\text{-}CH_2\text{-}CH(NH_2)\text{-}COOH$
lizyna kwas 2,6-diaminoheksanowy	Lys	K	$H_2N\text{-}[CH_2]_4\text{-}CH(NH_2)\text{-}COOH$
metionina kwas 2-amino-4-(metylotio)-butanowy	Met	M	$CH_3\text{-}S\text{-}[CH_2]_2\text{-}CH(NH_2)\text{-}COOH$
fenyloalanina kwas 2-amino-3-fenylopropanowy	Phe	F	$C_6H_5\text{-}CH_2\text{-}CH(NH_2)\text{-}COOH$
prolina kwas pirolidyno-2-karboksylowy	Pro	P	
seryna kwas 2-amino-3-hydroksy propanowy	Ser	S	$HO\text{-}CH_2\text{-}CH(NH_2)\text{-}COOH$
treonina kwas (2*S*,3*R*)-2-amino-3-hydroksy-butanowy (określanie konfiguracji patrz P-103.1.3.2.2)	Thr	T	$CH_3\text{-}CH(OH)\text{-}CH(NH_2)\text{-}COOH$
tryptofan kwas 2-amino-3-(1*H*-indol-3-ilo)propanowy	Trp	W	
tyrozyna kwas 2-amino-3-(4-hydroksy-fenylo)propanowy	Tyr	Y	
walina kwas 2-amino-3-metylobutanowy	Val	V	$(CH_3)_2CH\text{-}CH(NH_2)\text{-}COOH$
nieokreślony aminokwas	Xaa	X	

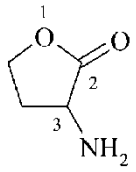
P-103.1.1.2 Zachowane nazwy ‘mniej pospolitych’ aminokwasów

Kilka innych mniej pospolitych aminokwasów, ich nazwy i symbole, przedstawiono w Tabeli 10.5. Pełny opis nazywania ‘mniej pospolitych’ aminokwasów zawiera publikacja ‘Nomenklatura i Symbole Aminokwasów i Peptydów’ (lit. 27).

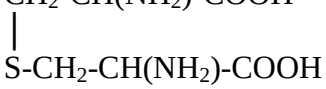
Tabela 10.5 Aminokwasy i ich zwyczajowe nazwy
(inne niż te podane w Tabeli 10.4)

Zachowana nazwa **Nazwa systematyczna**	**Symbol**	**Wzór**
β-alanina kwas 3-aminopropanowy	βAla	$H_2N\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}COOH$
alloizoleucyna kwas 2-amino-3-metylopentanowy (oznaczenie konfiguracji patrz P-103.1.3.2.2)	aIle	$CH_3\text{-}CH_2\text{-}CH(CH_3)\text{-}CH(NH_2)\text{-}COOH$
allotreonina kwas 2-amino-3-hydroksybutanowy (oznaczenie konfiguracji patrz P-103.1.3.2.2)	aThr	$CH_3\text{-}CH(OH)\text{-}CH(NH_2)\text{-}COOH$
allizyna kwas 2-amino-6-oksoheksanowy	---	$OHC\text{-}[CH_2]_3\text{-}CH(NH_2)\text{-}COOH$
cytrulina N^5-karbamoiloornityna	Cit	$NH_2\text{-}CO\text{-}NH\text{-}[CH_2]_3\text{-}CH(NH_2)\text{-}COOH$
cystationina *S*-(2-amino-2- karboksyetylo)homocysteina	Ala | Hcy	$HOOC\text{-}CH(NH_2)\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}S\text{-}$ $CH_2\text{-}CH(NH_2)\text{-}COOH$
kwas cysteinowy 3-sulfoalanina kwas 2-amino-3-sulfopropanowy	Cya	$HO_3S\text{-}CH_2\text{-}CH(NH_2)\text{-}COOH$
cystyna 3,3'-disulfanodiylodialanina	Cys | Cys	$S\text{-}CH_2\text{-}CH(NH_2)\text{-}COOH$ | $S\text{-}CH_2\text{-}CH(NH_2)\text{-}COOH$
dopa 3-hydroksytyrozyna	—	
homocysteina kwas 2-amino-4-sulfanylobutanowy	Hcy	$HS\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}CH(NH_2)\text{-}COOH$
homoseryna kwas 2-amino-4-hydroksybutanowy	Hse	$HO\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}CH(NH_2)\text{-}COOH$

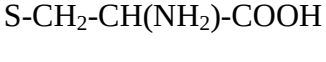
lakton homoseryny
3-aminooksolan-2-on — Hsl



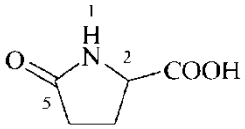
lantionina
3,3'-sulfanodiylodialanina — Ala–Cys



ornityna
kwas 2,5-diaminopentanowy — Orn

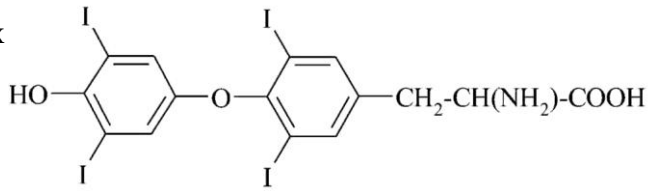


5-oksoprolina
kwas 5-oksopirolidyno-2-karboksylowy — Glp



sarkozyna
N-metyloglicyna — Sar

tyroksyna
O-(4-hydroksy-3,5-dijodofenylo)-
3,5-dijodotyrozyna — Thx

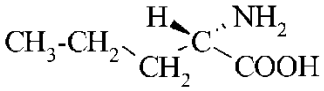


P-103.1.1.3 Systematyczne nazwy podstawnikowe

Dla aminokwasów nie mających zachowanych nazw tworzy się systematyczne nazwy podstawnikowe w oparciu o zasady, reguły i konwencje nomenklatury podstawnikowej.

Systematyczne nazwy podstawnikowe stosuje się dla homologów glicyny i alaniny, na przykład kwas 2-aminobutanowy, kwas 2-aminopentanowy (poprzednio ‘norwalina’) i kwas 2-aminoheksanowy (poprzednio ‘norleucyna’). Odpowiadają im trzyliterowe symbole odpowiednio: Abu, Ape i Ahx. Stereodeskryptory CIP *R* i *S* stosowane są do wskazania konfiguracji absolutnej przy atomie węgla C-2. Kwasy te i ich symbole są przedstawione w CP-13, lit. 27. Nazwy ‘norwalina’ i ‘norleucyna’ nie są nazwami zalecanymi (patrz 3AA-15.2.3, lit. 27).

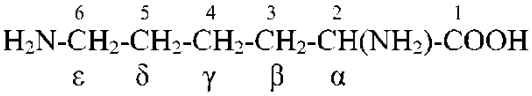
Przykład:



kwas (2*S*)-2-aminopentanowy
(trzyliterowy symbol: Ape)

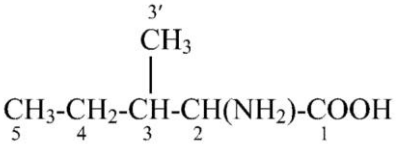
P-103.1.2 Numerowanie kwasów α-aminokarboksylowych

W acyklicznych aminokwasach atom węgla grupy karboksylowej sąsiadujący z atomem węgla związanym z grupą aminową jest oznaczany numerem ‘1’. Alternatywnie, można użyć greckie litery przy czym atom węgla C-2 oznacza się α.



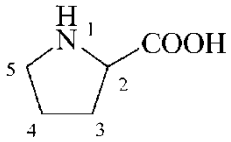
Heteroatom w grupie charakterystycznej ma ten sam numer co atom węgla, z którym jest związany, na przykład *N*-2 jest na atomie węgla C-2. Kiedy numerację tą stosuje się jako lokanty wówczas zapisywana jest w indeksie górnym, na przykład 'N^2'-acetylolizyna (patrz P-103.2.1).

Atomy węgla grup metylowych waliny są numerowane '4' i '4′'; podobnie te w leucynie '5'i '5′'. Numeracja atomów węgla w izoleucynie przedstawiona jest poniżej:



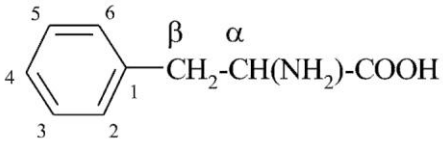
izoleucyna

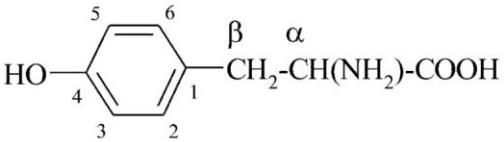
Atomy w prolinie są numerowane tak jak w pirolidynie, atom azotu jest oznaczony numerem '1' a atom węgla związany z grupą karboksylową numerem '2'.



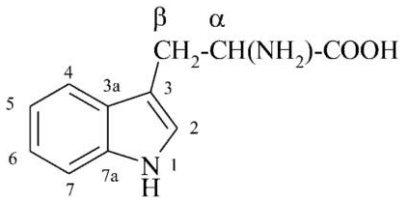
prolina

Atomy węgla w pierścieniu aromatycznym fenyloalaniny, tyrozyny i tryptofanu numeruje sią zgodnie z zasadami nomenklatury systematycznej. Atomy węgla w łańcuchu są oznaczone jako 'α' i 'β' jak to jest przedstawione poniżej:



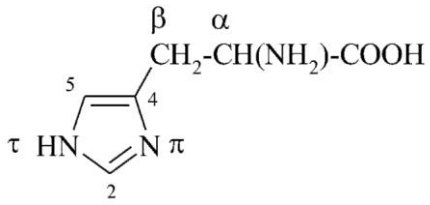


fenyloalanina tyrozyna



tryptofan

Specjalna numeracja składająca się z cyfr i greckich liter jest przypisana histydynie. Greckie litery π i τ są stosowane do oznaczenia atomów azotu w pierścieniu. Literą π oznaczony jest atom azotu leżący bliżej łańcucha bocznego, a atom azotu znajdujący się dalej od tego łańcucha literą τ.



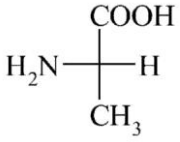
histydyna

P-103.1.3 Konfiguracja kwasów α-aminokarboksylowych

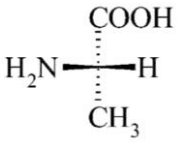
P-103.1.3.1 Stereodeskryptory ‘D’ i ‘L’

Konfiguracja absolutna atomu węgla α w kwasach α-aminokarboksylowych jest oznaczana stereodeskryptorem ‘D’ lub ‘L’ aby wskazać ich formalną relację z aldehydem ‘D - lub L-glicerynowym’. Natomiast w przypadku nieznanej konfiguracji stosuje się stereodeskryptor ‘ξ’ (grecka litera ksi).

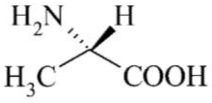
Struktura aminokwasów ilustrująca konfigurację może być zapisana na kilka sposobów: w projekcji Fischera (patrz P-102.3.1) lub w formie strukturalnego wzoru zawierającego zwykłe i klinowe (ciągłe i przerywane) wiązania (patrz P-91.1), jak jest to przedstawione poniżej dla L-alaniny:



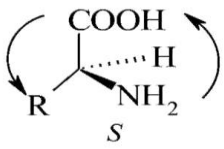
lub



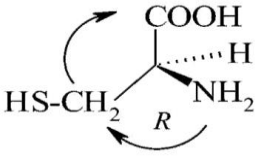
lub



Według systemu Cahna-Ingolda-Preloga (CIP) ‘L’ aminokwasy mają konfigurację ‘*S*’ z wyjątkiem L-cysteiny, dla której z reguły pierwszeństwa wynika konfiguracja ‘*R*’ (dotyczy to również cystyny, patrz P-103.1.1.2).



L = *S*



L = *R*, dla cysteiny

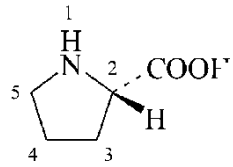
Mieszanina równomolowych ilości ‘D’ i ‘L’ aminokwasów określana jest jako ‘racemiczna’ i oznaczana stereodeskryptorem ‘DL’, na przykład ‘DL–leucyna’. Stereodeskryptor ‘DL’ preferowany jest względem ‘*rac*’, na przykład *rac*-leucyna.

P-103.1.3.2 Konfiguracja centrów chiralności innych niż atom węgla α

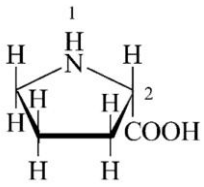
P-103.1.3.2.1 Zastosowanie stereodeskryptorówmetody CIP

Stereodeskryptory ‘*R*’ i ‘*S*’ są stosowane do oznaczania konfiguracji centrów chiralności innych niż atomu α-C, dla którego zachowuje się stereodeskryptory ‘D’ i ‘L’ by zachować jednorodność ze stereodeskryptorami w peptydach (patrz P-103.3.4). Zastosowanie stereodeskryptorów jest zaprezentowane poniżej dla hydroksyprolin. Dla tych związków w ogólnej

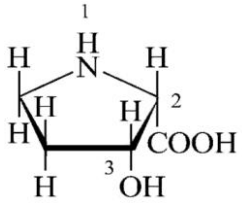
nomenklaturze i specjalistycznej nomenklaturze aminokwasówdopuszczalne jest również stosowanie stereodeskryptorów *cis* i *trans.*



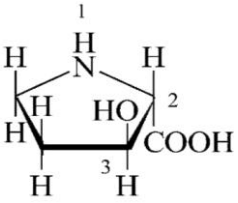
lub



L-prolina
(2*S*)-prolina



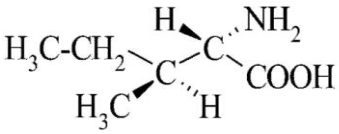
(3*R*)-3-hydroksy-L-prolina (PIN)
(2*S*,3*R*)-3-hydroksyprolina
cis-3-hydroksy-L-prolina



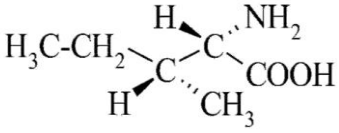
(3*S*)-3-hydroksy-L-prolina (PIN)
(2*S*,3*S*)-3-hydroksyprolina
trans-3-hydroksy-L-prolina

P-103.1.3.2.2 Stosowanie przedrostka ‘allo’

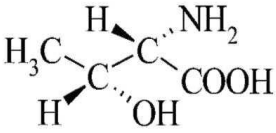
Przedrostek ‘allo’ jest stosowany do modyfikowania zachowanych nazw ‘leucyna’ i ‘treonina’, kiedy konfiguracja na atomie węgla C-3’ została odwrócona. Symbole aminokwasu zmienia się, odpowiednio, na ‘aIle’ i ‘aThr’.



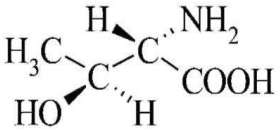
L-izoleucyna (symbol ‘Ile’, ‘I’)
kwas (2*S*,3*S*)-2-amino-3-metylopantanowy



L-alloizoleucyna (symbol ‘aIle’)
kwas (2*S*,3*R*)-2-amino-3-metylopantanowy



L-treonina (symbol ‘Thr’, ‘T’)
kwas (2*S*,3*R*)-2-amino-3-hydroksybutanowy



L-allotreonina (symbol ‘aThr’)
kwas (2*S*,3*S*)-2-amino-3-hydroksybutanowy

P-103.2 POCHODNE AMINOKWASÓW

Zachowane nazwy aminokwasów służą do tworzenia nazw soli, estrów i grup acylowych oraz pochodnych utworzonych przez podstawienie na atomach węgla i azotu lub funkcjonalizacji atomów tlenu i siarki.

Grupa karboksylowa, -COOH, może być przekształcana w różne grupy charakterystyczne takie jak grupa hydroksymetylowa, $-CH_2-OH$, czy grupa aldehydowa, CHO. Niektóre nazwy pochodzące od zachowanych nazw aminokwasów są zalecane do nazywania amidów, alkoholi, aldehydów, a nawet ketonów w kontekście nomenklatury peptydów i białek.

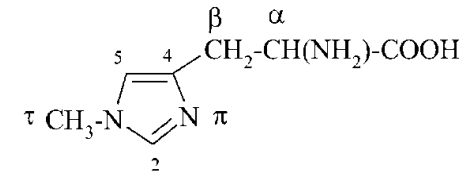
P-103.2.1 System przypisywania lokantów
P-103.2.2 Nazwy podstawników
P-103.2.3 Pochodne utworzone przez podstawienie
P-103.2.4 Jonizacja grup charakterystycznych
P-103.2.5 Grupy acylowe
P-103.2.6 Estry
P-103.2.7 Amidy i inne pochodne azotowe
P-103.2.8 Aldehydy, ketony i alkohole

P-103.2.1 System przypisywania lokantów

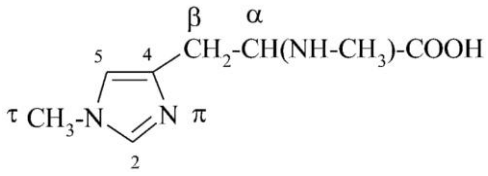
Zaleca się użycie lokantów '*N'*, '*O*' i *'S*' wraz z lokantem liczbowym, w indeksie górnym, odpowiadający numerowi atomu węgla z którym związany jest dany atom azotu, tlenu lub siarki dla atomów, których jest więcej niż jeden. Lokanty 'N^{2}' i 'N^{6}' zalecane są dla lizyny, 'N^{α}', *'*N^{δ}', *'*N^{ω}' dla argininy, 'N^{2}'i 'N^{5}' dla glutaminy, 'N^{2}' i 'N^{4}'dla asparaginy, 'N^{α}', 'N^{π}' i 'N^{τ}' dla histydyny, według numeracji odpowiednich α-aminokwasów opisanej w P-103.1.2. W przypadku gdy obecny jest tylko jeden atom azotu, zalecany jest lokant '*N'*; lokant liczbowy pomijany jest nawet gdy inne lokanty są obecne w nazwie.

W przypadku występowania dwóch identycznych podstawników, stosuje się jednoliterowy lokant umieszczony pomiędzy przedrostkiem zwielokrotniającym, a nazwą podstawnika.

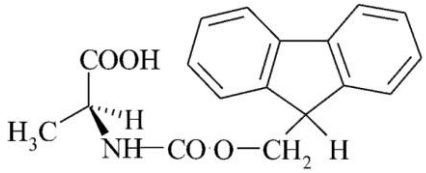
Przykłady:



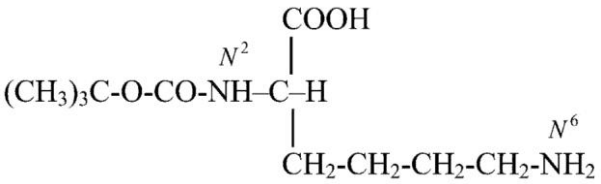
N^{τ}-metylo-L-histydyna



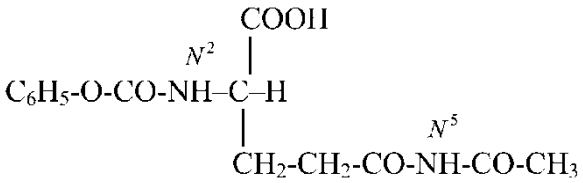
N^{α},N^{τ}-dimetylo-L-histydyna



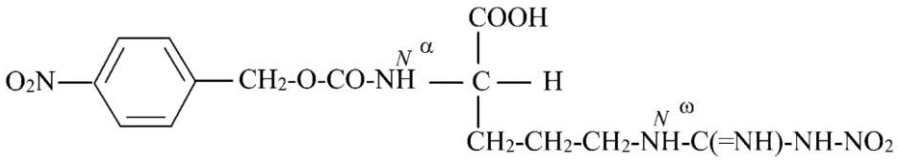
N-[(9*H*-fluoren-9-ylometoksy)karbonylo]-L-alanina



N^2-(*tert*-butoksykarbonylo)-L-lizyna



N^5-acetylo-N^2-[(benzyloksy)karbonylo]-L-glutamina



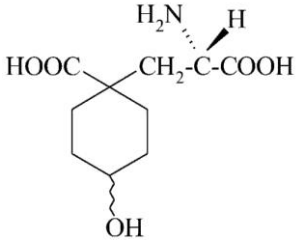
N^{α}-{[(4-nitrobenzylo)oksy]karbonylo}-N^{ω}-nitro-L-arginina

P-103.2.2 Nazwy podstawników

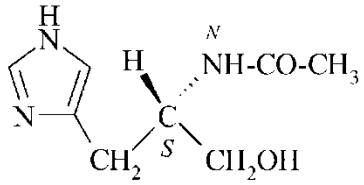
W sytuacji gdy kwasy α-aminokarboksylowe muszą być wymienione jako podstawniki w obecności grup charakterystycznych mających starszeństwo jako przyrostek, tworzy się odpowiednie przedrostki według następujących zasad.

P-103.2.2.1 Podstawniki z wolną walencyjnością na atomie węgla kwasu α-aminokarboksylowego tworzy się zgodnie z zasadami, regułami i konwencjami nomenklatury podstawnikowej przedstawionej w poprzednich rozdziałach tych zaleceń.

Przykłady:



kwas 1-[(2*S*)-2-amino-2-karboksyetylo]-4ξ-hydroksycykloheksano-1-karboksylowy



N-[(2*S*)-1-hydroksy-3-(1*H*-imidazol-4-ilo)propan-2-ylo]acetamid

P-103.2.2.2 Podstawniki z wolną walencyjnością na atomie azotu

Nazwy podstawników z wolną walencyjnością na atomie azotu kwasu α-aminokarboksylowego, powstałych w wyniku usunięcia atomu wodoru z grupy aminowej aminokwasu, można utworzyć poprzez zamianę końcowej litery ‘a’ w nazwie α-aminokwasu na literę ‘o’, dodanie litery ‘o’ do nazwy tryptofan oraz utworzenie nazw asparagino i glutamino, odpowiednio z kwasu asparaginowego i glutaminowego.

Przykład:

-HN-CH_2-COOH glicyno
(karboksymetylo)amino

W przypadku gdy w aminokwasie występuje więcej niż jeden atom azotu, zaleca się stosowanie lokantu ‘N^x’.

Przykłady:

-HN-[CH_2]$_4$-CH(NH_2)-COOH N^6-lizyno
(4-amino-5-karboksypentylo)amino

-HN-C(=NH)-NH-[CH_2]$_3$-CH(NH_2)-COOH

N^ω-arginino
N'-[(4-amino-4-karboksybutylo)amino]karbamimidamido

-HN-CO-[CH_2]$_2$-CH(NH_2)-COOH

N^5-glutamin
4-amino-4-karboksybutanamido

P-103.2.2.3 Podstawniki z wolną walencyjnością na atomie tlenu lub siarki powstałe przez usunięcie atomu wodoru z atomu tlenu lub siarki, można nazwać zamieniając końcową literę ‘a’ w nazwie α-aminokwasu na ‘x-yl’, gdzie x jest lokantem atomu z którego usunięto atom wodoru, na przykład cystein-*S*-yl, treonin-*O*-yl.

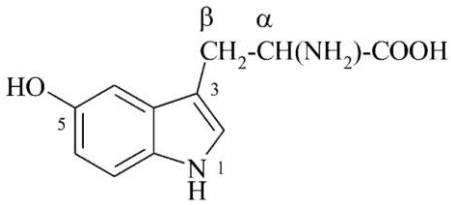
Przykład:

-S-CH_2-CH(NH_2)-COOH cystein-*S*-yl
(2-amino-2-karboksyetylo)sulfanyl

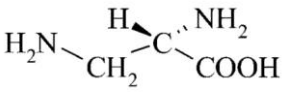
P-103.2.3 Pochodne utworzone poprzez podstawienie

Do wskazania podstawienia na atomie węgla, azotu, tlenu i siarki używa się zachowane nazwy. Podstawienie na atomach węgla podlega zasadom, regułom i konwencjom nomenklatury podstawnikowej. Lokanty liczbowe i lokanty '*N*', '*O*' i ' *S*' wskazują położenie podstawionych atomów azotu, tlenu lub siarki. Dla lizyny stosuję się lokanty 'N^2' i 'N^6' w celu wskazania dwóch grup aminowych położonych odpowiednio w pozycji '2' i '6'.

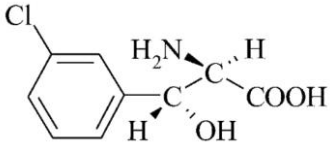
Przykłady:



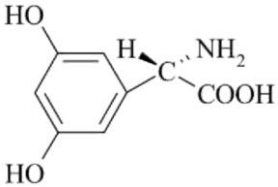
5-hydroksytryptofan



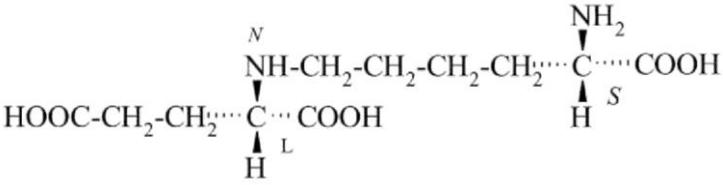
3-amino-L-alanina
kwas (2*S*)-2,3-diaminopropanowy
kwas L-2,3-diaminopropanowy
(2*S*)-2-amino-β-alanina (patrz lit. 27)



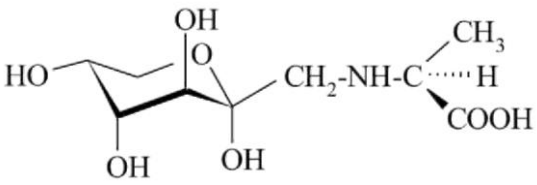
kwas (2*R*,3*R*)-2-amino-3-(3-chlorofenylo)-3-hydroksypropanowy
(β*R*)-3-chloro-β-hydroksy-D-fenyloalanina



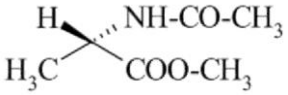
kwas (2*S*)-2-amino-2-(3,5-dihydroksyfenylo)octowy
2-(3,5-dihydroksyfenylo)-L-glicyna



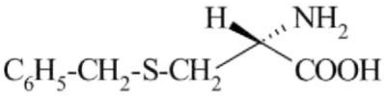
kwas *N*-[(5*S*)-5-amino-5-karboksypentylo]-L-glutaminowy



N-(1-deoksy-α-D-fruktopiranoz-1-ylo)-L-alanina



N-acetylo-L-alaninian metylu



S-benzylo-L-cysteina

$(HO)_2N\text{-}CH_2\text{-}COOH$ *N*,*N*-dihydroksyglicyna

$(HO)_2N\text{-}CH(NH_2)\text{-}COOCH_3$

kwas *N*-(1-amino-2-metoksy-2-oksoetylo)azonawy
[kwas, kwas azonawy $(HO)_2NH$, ma pierwszeństwo względem estru, patrz P-67.1.1.1]

P-103.2.4 Jonizacja grup charakterystycznych

P-103.2.4.1 Dominującą formą kwasu monoamino monokarboksylowego w środowisku obojętnym (pH 7) jest $R\text{-}CH(NH_3^+)\text{-}COO^-$ zamiast $R\text{-}CH(NH_2)\text{-}COOH$. Niemniej jednak bardziej praktyczne jest rysowanie form konwencjonalnych jak w Tabelach 10.4 i 10.5 oraz nazywanie aminokwasu alaniny jako kwas 2-aminopropanowy zamiast 2-amoniumylopropanian albo 2-amoniopropanian jak pokazano w Rozdziale P-7 (P-74.1.3).

Jest to szczególnie istotne w przypadku przedstawiania form izoelektrycznych aminokwasów mających inne grupy jonizujące, jak na przykład roztwór lizyny, który zawiera znaczące ilości obu form:

$NH_3^+\text{-}[CH_2]_4\text{-}CH(NH_2)\text{-}COO^-$ oraz $NH_2\text{-}[CH_2]_4\text{-}CH(NH_3^+)\text{-}COO^-$

P-103.2.4.2 Gdy pożądane jest zaznaczenie jonowego charakteru aminokwasu, kationy lub aniony pochodzące z kwasu monoamino monokarboksylowego można wskazać następująco:dla anionu końcówka ‘ian’ zastępuje ‘kwas –owy’ lub końcówkę ‘a’ nazwy zwyczajowej, albo jest dodawana do nazwy tryptofan):

Przykłady:

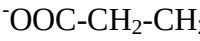
glicynian
anion glicyny

glicynium
kation glicyny

P-103.2.4.3 Dodatkowe formy są wymagane dla aminokwasów zawierających dwie grupy aminowe lub dwie grupy karboksylowe.

P-103.2.4.3.1 Aniony kwasów asparaginowego i glutaminowego z jednym ładunkiem (dokładniej każdy ma jeden ładunek dodatni i dwa ładunki ujemne, jednak ta nomenklatura odnosi się do ładunku wypadkowego) można odróżnić od podwójnie naładowanych anionów poprzez umieszczenie ładunku za nazwą lub zaznaczenie liczby zobojętnianych kationów.
Przykłady:

glutaminian (1-)
glutaminian wodoru
monoanion kwasu glutaminowego



glutaminian sodu (1-)
glutaminian wodoru sodu
glutaminian monosodu

glutaminian (2-)
dianion kwasu glutaminowego
glutaminian (nieokreślona nazwa ‘glutaminian’ oznacza dianion)

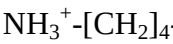
glutaminian disodu

P-103.2.4.3.2 Pojedynczo naładowane kationy asparaginy, glutaminy i lizyny (dokładniej każda ma dwa ładunki dodatnie i jeden ładunek ujemny, jednakże ta nomenklatura odnosi się do ładunku wypadkowego) można odróżnić od podwójnie naładowanych kationów umieszczając ładunek za nazwą, stosując wyrażenie ‘monokation’, lub określając liczbę zobojętnianych anionów. Położenie ładunku można określić za pomocą lokantu *N* z indeksem górnym przed końcówką ‘ium’.

Przykłady:

lizynium (1+)
monokation lizyny
lizyn-N^2-ium

chlorek lizyniumy (1+)
monochlorowodorek lizyny
chlorek lizyn-N^2-ium



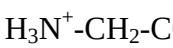
lizynium (2+)
dikation lizyny
lizyno-N^2,N^6-diium

P-103.2.4.4 Nazwy zwitterjonowych aminokwasów tworzy się na dwa sposoby:

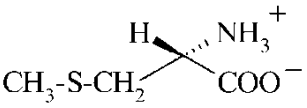
(1) Dodając do nazwy macierzystego anionu przedrostek w postaci nazwy podstawnika kationowego (patrz P-74.1.3) i stosując stereodeskryptory CIP do wskazania konfiguracji;

(2) Dodając termin ‘zwitterjon’' przed nazwą aminokwasu.

Przykłady:



azaniumylooctan
zwitterjon glicyny



(2*S*)-2-amoniumylo-3-metylosulfanylo)propanian
zwitterjon *S*-metylo-1-cysteiny

P-103.2.5 Grupy acylowe

Grupy acylowe pochodzące od aminokwasów, na przykład H_2N-CHR-CO- nazywa się zamieniając końcówki ‘ina’ lub ‘yna’ (w przypadku tryptofanu ‘an’) na końcówkę ‘yl’, na przykład alanyl, leucyl. W przypadku nazw walina i prolina końcówka ‘ina’ zamieniana jest na końcówkę ‘il’. Obowiązuje nazwa ‘cysteinyl’zamiast ‘cystyl’; ‘cystyl’ pochodzi od ‘cystyny’(patrz P-103.1.1.2).

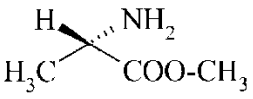
Następujące nazwy stosuje się do nazywania grup acylowych pochodzących od aminokwasów dikarboksylowych i ich odpowiednich amidów:

HOOC-CH_2-CH(NH_2)-CO-	-CO-CH_2-CH(NH_2)-COOH
α-aspartyl	β-aspartyl
aspart-1-yl	aspart-4-yl
-CO-CH_2-CH(NH_2)-CO-	HOOC-CH_2-CH_2-CH(NH_2)-CO-
aspartoil	α-glutamyl
	glutam-1-yl
-CO-CH_2-CH_2-CH(NH_2)-COOH	-CO-CH_2-CH_2-CH(NH_2)-CO-
γ-glutamyl	glutamoil
glutam-5-yl	
H_2N-CO-CH_2-CH(NH_2)-CO-	NH_2-CO-CH_2-CH_2-CH(NH_2)-CO-
asparaginyl	glutaminyl

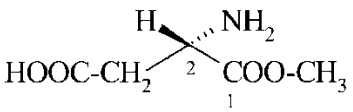
P-103.2.6 Estry

Nazwy estrów aminokwasów, R-CO-OR′, tworzy się dodając końcówkę ‘ian’ do nazwy zachowanej aminokwasu, z której usunięto końcową literę 'a' (lub dodając końcówkę ‘ian’ do nazwy ‘tryptofan’) i wymieniając nazwę podstawnika R′.

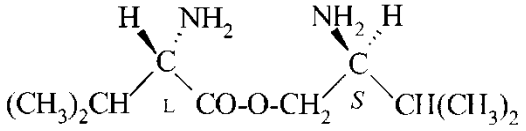
Przykłady:



L-alaninian metylu
ester metylowy L-alaniny



L-asparaginian 1-metylu



L-walinian (2*S*)-2-amino-3-metylobutylu

P-103.2.7 Amidy, anilidy, hydrazydy i inne azotowe analogi

Amidy, anilidy, hydrazydy i inne azotowe analogi utworzone z aminokwasów nazywa się systematycznie.

Nazwy amidowych pochodnych aminokwasów tworzy się zamieniając końcową literę ‘a’ w nazwach aminokwasów, kiedy to właściwe, na ‘amid’ lub dodaje się końcówkę ‘amid’ do nazwy ‘tryptofan’.

Przykłady:

$H_2N\text{-}CH_2\text{-}CO\text{-}NH_2$ 2-aminoacetamid
glicynoamid

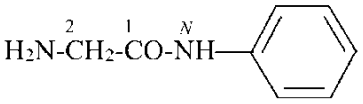
4-Amid kwasu asparaginowego oraz 5-amid kwasu glutaminowego mają odpowiednio nazwy asparagina i glutamina (patrz Tabela 10.4). Nazwy ich 1-amidów tworzy się w następujący sposób:

$H_2N\text{-}CO\text{-}CH_2\text{-}CH(NH_2)\text{-}CO\text{-}NH_2$
2-aminobutanodiamid
asparaginoamid

$H_2N\text{-}CO\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}CH(NH_2)\text{-}CO\text{-}NH_2$
2-aminopentanodiamid
glutaminoamid

Nazwy anilidów tworzy się przez *N*-podstawienie grupy amidowej grupą fenylową lub podstawioną grupą fenylową. Końcówka ‘anilid’ może być stosowana w miejsce końcówki ‘amid’:

Przykład:



2-amino-1-*N*-fenyloacetamid
glicynoanilid

Podstawienie na atomach azotu w amidach aminokwasów wyraża się systematycznie według metod opisanych dla amidów (P-66.1.1.3) i amin (P-62.2.2.1).

Przykłady:

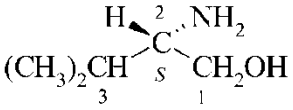
$CH_3\text{-}NH\text{-}CH_2\text{-}CO\text{-}NH\text{-}CH_2\text{-}CH_3$ *N*-etylo-2-(metyloamino)acetamid

$CH_3\text{-}CO\text{-}NH\text{-}CH_2\text{-}CO\text{-}NH_2$ 2-(acetyloamino)acetamid
2-acetamidoacetamid
N^2-acetyloglicynoamid

P-103.2.8 Alkohole, aldehydy, ketony i nitryle

Nazwy alkoholi, aldehydów, ketonów i nitryli odpowiadających aminokwasom ze zwyczajowymi zachowanymi nazwami tworzy się systematycznie stosując zasady, reguły i konwencje nomenklatury podstawnikowej. Końcówki ‘ol’ ‘al’ i ‘onitryl’ dodaje się do nazw zachowanych, z których usunięto ostatnia literę ‘a’, mogą być też zastosowane do określenia zmiany w grupie charakterystycznej aminokwasu. Ketony nazywa się stosując systematyczną nomenklaturę podstawnikową IUPAC z zastosowaniem, w razie potrzeby, stereodeskryptorów *‘R*’ i ‘*S*’.

Przykłady:



(2*S*)-2-amino-3-metylobutan-1-ol
L-walinol

$(CH_3)_2CH\text{-}CH_2\text{-}CH(NH_2)\text{-}CHO$	2-amino-4-metylopentanal leucynal
$H_2N\text{-}CH_2\text{-}CO\text{-}CH_2Cl$	1-amino-3-chloropropan-2-on
$H_2N\text{-}CH_2\text{-}C{\equiv}N$	aminoacetonitryl glicynonitryl

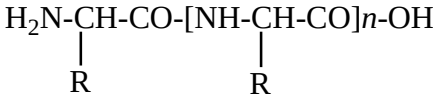
P-103.3 NOMENKLATURA PEPTYDÓW

Nomenklatura peptydów jest wysoce wyspecjalizowana i została szczegółowo omówiona w lit. 18. Natomiast dokument obejmujący nomenklaturę cyklicznych peptydów jest obecnie w przygotowaniu przez Chemical Nomenclature and Structure Representation Division IUPAC.

P-103.3.1 Definicje
P-103.3.2 Nazwy peptydów
P-103.3.3 Symbole peptydów
P-103.3.4 Określanie konfiguracji peptydów
P-103.3.5 Modyfikacje peptydów o ustalonej nazwie
P-103.3.6 Cykliczne peptydy

P-103.3.1 Definicje

Peptydy są amidami powstałymi z dwóch lub więcej cząsteczek kwasów aminokarboksylowych (takich samych lub różnych) połączonych wiązaniem kowalencyjnym utworzonym pomiędzy atomem węgla grupy karbonylowej jednej cząsteczki a atomem azotu kolejnej cząsteczki z usunięciem wody. Nazwę tę stosuje się zazwyczaj do struktur utworzonych z kwasów α-aminokarboksylowych, jednakże dotyczy ona struktur utworzonych z jakichkolwiek kwasów aminokarboksylowych. W poniższym przykładzie, ‘R’ może być dowolną grupą organylową, często lecz nie koniecznie występującej w naturalnych aminokwasach (patrz Tabela 10.4).



Wiązania amidowe w peptydach nazywa się ‘wiązaniami peptydowymi’. Wiązania peptydowe utworzone pomiędzy atomem węgla ‘C-1’ a atomem azotu ‘N-2’ kolejnego aminokwasu nazywa się ‘wiązania eupeptydowe’. Natomiast wiązania utworzone pomiędzy atomem węgla grupy karboksylowej jednego aminokwasu a atomem azotu grupy aminowej innego aminokwasu, z których przynajmniej jedna z tych grup nie jest połączona z atomem węgla w pozycji α aminokwasu nazywa się ‘wiązanie izopeptydowe’.

P-103.3.2 Nazwy peptydów

Aby nazwać peptydy, stosuje się nazwy grup acylowych z końcówką ‘yl’ (patrz P-103.2.5). Dlatego dipeptyd, H_2N-CH_2-CO-NH-CH(CH_3)-COOH, zbudowany z aminokwasów glicyny, H_2N-CH_2-COOH, i alaniny, H_2N-CH(CH_3)-COOH, nosi nazwę glicyloalanina. Natomiast gdy aminokwasy te połączą się w odwrotnej kolejności to produkt, H_2N-CH(CH_3)-CO-NH-CH_2-COOH, będzie nosił nazwę alanyloglicyna. Podobnie nazywa się bardziej złożone peptydy, na przykład alanyloleucylotryptofan.

P-103.3.3 Symbole peptydów

Peptyd glicyloglicyloglicyna można zapisać symbolicznie : Gly-Gly-Gly. Zapis ten zawiera trzy warianty symbolu Gly dla glicyny, HN_2-CH_2-COOH, różniących się położeniem myślników:

(a) Gly- = H_2N-CH_2-CO-

(b) -Gly = -HN-CH_2-COOH

(c) -Gly- = -HN-CH_2-CO-

Myślnik, oznaczający wiązanie peptydowe, symbolizuje usunięcie grupy –OH z grupy -COOH aminokwasu gdy zapisany jest po stronie prawej lub atomu wodoru z grupy $-NH_2$ aminokwasu gdy zapisany jest po stronie lewej symbolu aminokwasu.

P-103.3.4 Określanie konfiguracji peptydów

Stereodeskryptor ‘L’ nie jest zalecany ani w nazwach ani w symbolach peptydów zbudowanych z aminokwasów przedstawionych w Tabeli 10.4. W przeciwieństwie do stereodeskryptora ‘D’, który należy umieszczać przed grupą acylową lub nazwą każdego składnika mającego taką konfigurację.

Przykład:

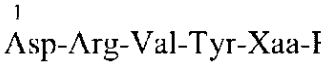
Leu-D-Glu-L-aThr-D-Val-Leu (symbol aThr oznacza allotreonine)
L-leucylo-D-glutamylo-L-allotreonylo-D-walinylo-L-leucyna

Symbol ‘DL’ stosuję się do wskazania mieszaniny racemicznej gdy obecne jest jedno centrum chiralności (P-103.1.3.1), jednak symbol ten nie jest dopuszczalny w przypadku peptydów ponieważ

wskazywałby występowanie diastereoizomerów w nieznanej proporcji. W celu zaznaczenia obecności obu stereoizomerów stosuje się, zapisany kursywą, przedrostek *ambo,* na przykład w wyniku acylowania DL-leucyny DL-alaniną otrzymuje się *ambo*-alanyloleucynę lub *ambo*-Ala-Leu. Resztę o nieznanej konfiguracji wskazuje się stereodeskryptorrm ‘ξ’ (grecka litera ksi). Enancjomer peptydu mającego zachowaną nazwę jest określony za pomocą przedrostka *ent* (dla *enantio* patrz P-101.8.1), na przykład *ent*-bradykinina z bradykininy.

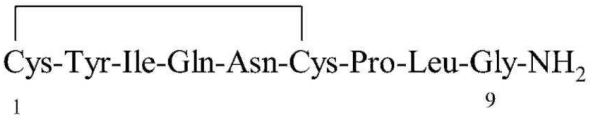
P-103.3.5 Modyfikacje peptydów o zachowanej nazwie.

Często ze względów praktycznych określa się strukturę przez odniesienie do zachowanej nazwy sekwencji, której dany peptyd jest wariantem. Poniższe zalecenia zezwalające na to dotyczą tylko modyfikacji sekwencji dotyczących normalnych połączeń amidowych pomiędzy resztami. W celu zilustrowania tych zaleceń poniżej przedstawiono zachowane nazwy angiotensyny II, bradykininy, oksytocyny i insuliny (ludzkiej).



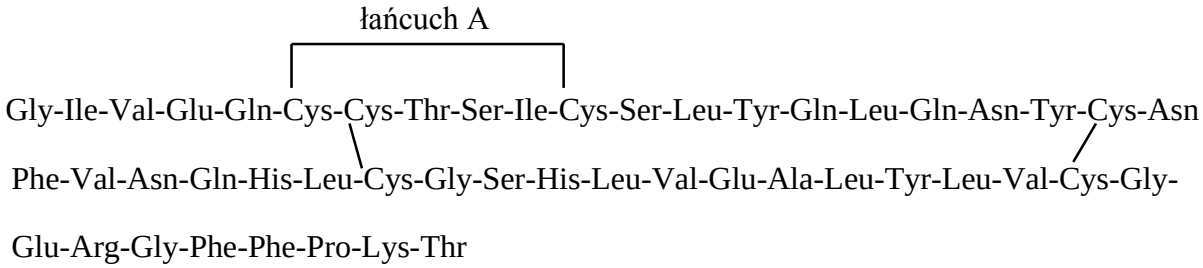
angiotensyna II

Arg-Pro-Pro-Gly-Phe-Ser-Pro-Phe-Arg bradykinina



oksytocyna

Określenie sekwencji może wymagać podania nazwy gatunku organizmu z jakiego dany peptyd pochodzi wraz z nazwą peptydu (patrz insulina). Nazwa gatunku zapisywana jest w takim przypadku w nawiasie za nazwą peptydu.



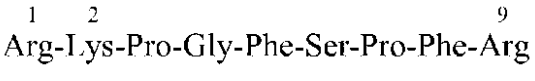
insulina (ludzka)

P-103.3.5.1 Wymiana reszt aminokwasów
P-103.3.5.2 Przedłużanie łańcucha peptydowego
P-103.3.5.3 Wstawianie reszt aminokwasów
P-103.3.5.4 Usuwanie reszt aminokwasów

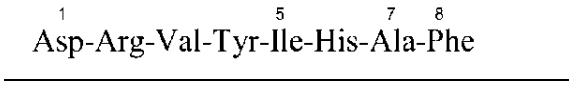
P-103.3.5.1 Wymiana reszt aminokwasów

Gdy w peptydzie o nazwie zwyczajowej bradykinina, *q*–enta reszta aminokwasowa, zaczynając od ‘N-końca’ łańcucha peptydu, wymieniana jest na aminokwas ‘Xaa’, nazwa tak zmodyfikowanego peptydu jest [*q*-aminokwas]bradykinina lub w skróconej postaci [Xaa^{q}]bradykinina. W pełnej nazwie zmodyfikowanego peptydu wprowadzany aminokwas jest określany z zastosowaniem nazwy tego aminokwasu, a nie nazwy jego grupy acylowej (np. alanina, a nie alanylo). W postaci skróconej, reszty aminokwasowe przedstawia się za pomocą trójliterowych symboli. Natomiast pozycję wymiany wskazuje się w indeksie górnym.

Przykłady:

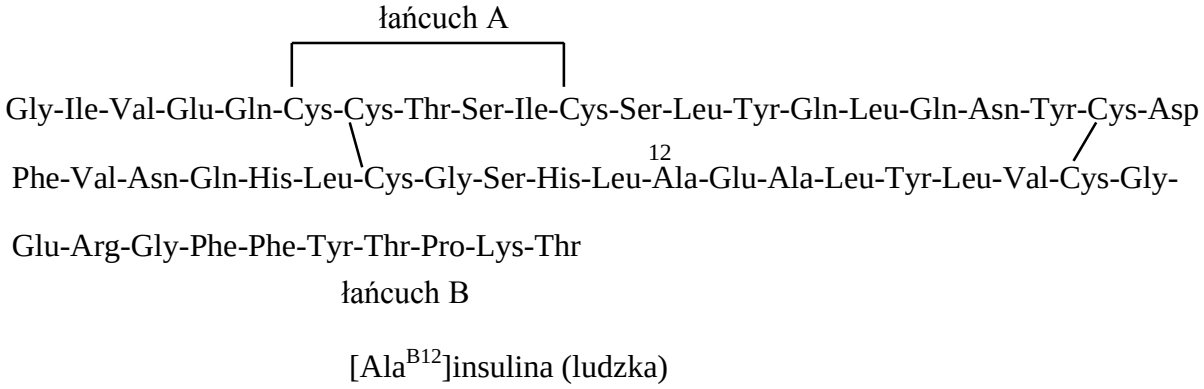


[2-lizyna]bradykinina
[Lys^{2}]bradykinina

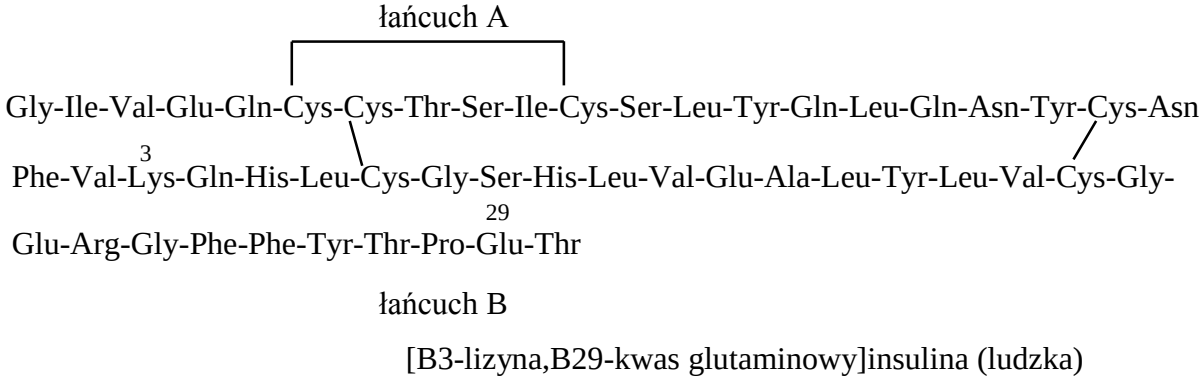


[5-izoleucyna,7-alanina]angiotensyna II
[Ile^{5}, Ala^{5}]angiotensyna II

P-103.3.5.1.1 Określenie sekwencji może wymagać podania nazwy gatunku organizmu z jakiego dany peptyd pochodzi wraz z nazwą peptydu. Nazwa gatunku zapisywana jest w takim przypadku w nawiasie za nazwą peptydu zawsze gdy dodawany jest zmieniony przedrostek.



[Ala^{B12}]insulina (ludzka)



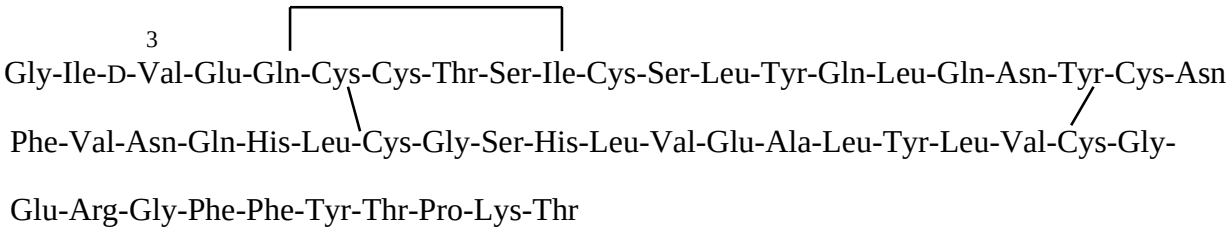
[B3-lizyna,B29-kwas glutaminowy]insulina (ludzka)

P-103.3.5.1.2 Wymiana reszty aminokwasu na jego enancjomer określa się w następujący sposób: zamianiając L-prolinę w pozycji 3 na D-prolinę otrzymujemy peptyd o nazwie [3-D-

prolina]bradykinina z formą skrótową [D-Pro^3]bradykinina. Natomiast do opisu występowania obu enancjomerów stosuje się nazwy [3-*ambo*-prolina]bradykinina lub [*ambo*-Pro^3]bradykinina.

Przykład:

łańcuch A



łańcuch B

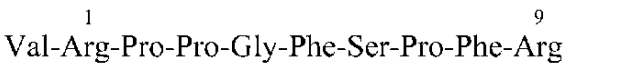
[D-Val^{A3}]insulina (ludzka)

P-103.3.5.2 Przedłużanie łańcucha peptydowego

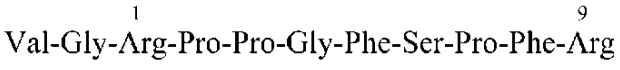
Zasady nazywania związków uzyskanych przez przedłużenie łańcucha peptydowego na N-końcu lub C-końcu przedstawiono poniżej.

P-103.3.5.2.1 Przedłużanie na ‘N-końcu’

Przykłady:

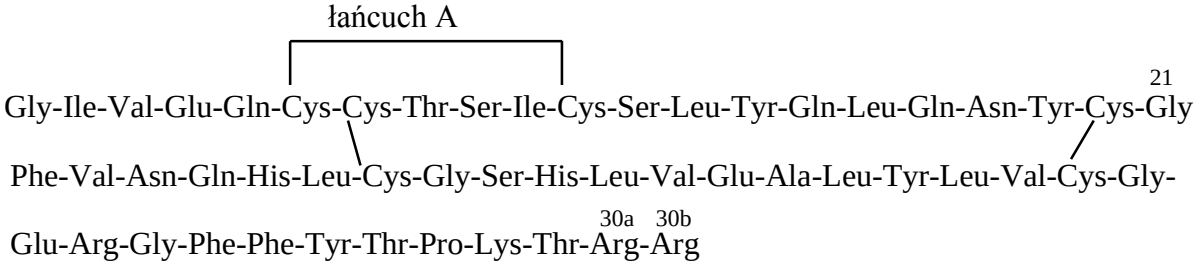


walilobradykinina
Val-bradykinina



waliloglicylobradykinina
Val-Gly-bradykinina

łańcuch A

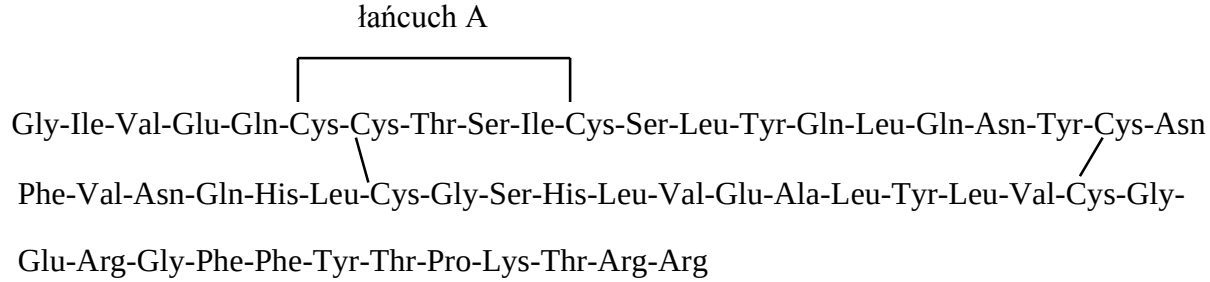


łańcuch B

[A21-glicyna]insulin-B30-ylo-L-argininylo-L-arginina] (ludzka)
(insulina ta została zmodyfikowana poprzez wymianę w łańcuchu A
oraz wydłużenie na C-końcu w łańcuchu B)

P-103.3.5.2.2 Przedłużanie na ‘C-końcu’

^{1}Arg-Pro-Pro-Gly-Phe-Ser-Pro-Phe-Arg^{9}-Leu bradykininyloleucyna
bradykininyl-Leu



insulin-B30-ylo-L-argininylo-L-arginina (ludzka)

P-103.3.5.3 Wstawianie reszt aminokwasowych

W nomenklaturze peptydów przedrostek ‘endo’ (nie zapisany kursywą) stosuję się do zaznaczenia wstawienia reszty aminokwasowej w dokładnie określonej pozycji peptydu. Na przykład nazwa endo-6a-alanina-bradykinina lub [endo-Ala^{6a}]bradykinina oznacza, iż reszta aminokwasowa ‘alanylo’ została wstawiona pomiędzy pozycję 6 i 7 w strukturze bradykininy. Przedrostka ‘endo’ nie należy mylić z zalecanym stereodeskryptorem ‘*endo*’ (pisanym kursywą) opisanym w P-93.5.2.2.1.

Przykład:

Arg-Pro-Pro-Gly-Phe-Ser-^{6}Ala^{6a}-Pro^{7}-Phe-Arg^{9} endo-6a-alanina-bradykinina
[endo-Ala^{6a}]bradykinina

Wstawianie wielokrotne i wstawienie maksymalnie dwóch reszt razem w tym samym miejscu w łańcuchu określa się poprzez rozszerzenie powyższej zasady. Dlatego peptyd otrzymany w wyniku wstawienia do struktury bradykininy treoniny pomiędzy reszty 1 i 2, oraz waliny i glicyny (w podanej kolejności) pomiędzy reszty 4 i 5 nosi nazwę ‘endo-1a-treonina,4a-walina,4b-glicyna-bradykinina’ lub ‘endo-Thr^{1a},Val^{4a},Gly^{4b}-bradykinina’.

Przykład:

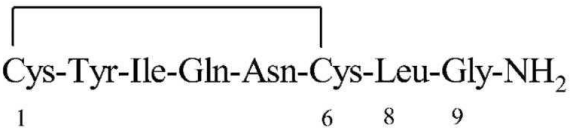
^{1}Arg-^{1a}Thr-^{2}Pro-Pro-^{4}Gly-^{4a}Val-^{4b}Gly-^{5}Phe-Ser-Pro-Phe-^{9}Arg

endo-1a-treonina,4a-walina,4b-glicyna-bradykinina
endo-Thr^{1a},Val^{4a},Gly^{4b}-bradykinina

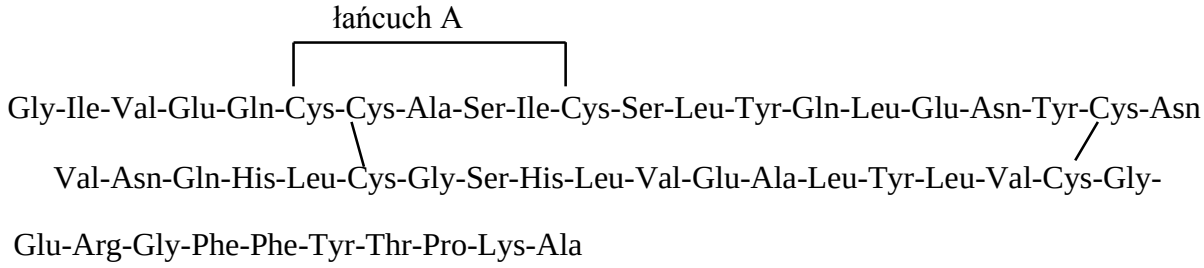
P-103.3.5.4 Usuwanie reszt aminokwasowych

Subtraktywny przedrostek ‘des’ w nomenklaturze peptydów stosuję się w celu wskazania reszty aminokwasu usuniętej z określonej pozycji w strukturze peptydu. Na przykład, nazwa des-8-fenyloalanina-bradykinina lub w skrócie des-Phe^{8}-bradykinina oznacza, iż reszta aminokwasu 'fenyloalaniny' została usunięta z pozycji 8 łańcucha bradykininy. Zastosowanie przedrostka ‘des’ do opisu modyfikacji struktur macierzystych przedstawiono także w P-101. Jest on stosowany do wskazania usunięcia końcowego pierścienia w steroidach i przyłączenia odpowiedniej liczby atomów wodoru do każdego końca sąsiedniego pierścienia.

Przykłady:



des-7-prolina-oksytocyna
des-Pro7-oksytocyna



des-B1-fenyloalanina-insulina (bydlęca)
des-Phe^{B1}-insulina (bydlęca)

P-103.3.6 Cykliczne peptydy

Peptydy cykliczne zawierają pierścienie powstałe z peptydów niecyklicznych poprzez tworzenie wiązań peptydowych lub estrowych, mostków dwusiarczkowych, wiązań węgiel-węgiel, węgiel-azot, węgiel-tlen lub węgiel siarka (wyłączając estry i amidy). W cyklicznych peptydach, w których pierścienie zawierają jedynie reszty aminokwasowe z wiązaniami eupeptydowymi nazywa się homodetycznymi cyklicznymi peptydami, natomiast z wiązaniami eupeptydowymi i izopeptydowymi nazywa się heterodetycznymi cyklicznymi peptydami. Ten aspekt nomenklatury peptydów jest na etapie opracowywania przez IUPAC.

P-104 CYKLITOLE

P-104.0 Wprowadzenie
P-104.1 Definicje
P-104.2 Tworzenie nazwy
P-104.3 Pochodne cyklitoli

P-104.0 WPROWADZENIE

Nomenklatura cyklitoli jest opisana w dokumencie zatytułowanym ‘Nomenklatura cyklitoli, Zalecenia 1973’ (lit. 39).

P-104.1 DEFINICJE

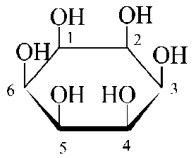
Cyklitole są cykloalkanami, w których trzy lub więcej atomów w pierścieniu jest podstawionych, każdy jedną, grupą hydroksylową. Inozytole, cykloheksan-1,2,3,4,5,6-heksaole, są specyficzną grupą cyklitoli.

Inozytole mają zachowane nazwy i wraz z ich *O*-alkilo, *O*-arylo, alkanianymi/karboksylowymi estrami i pochodnymi aminowymi (gdzie grupa -OH zastąpiona jest grupą -NH_2) do określenia ich konfiguracji stosuje się stereodeskryptory ‘D’ i ‘L’. Inne nazwy cyklitoli są systematycznymi nazwami podstawnikowymi, których konfigurację opisuje się za pomocą stereodeskryptorów CIP.

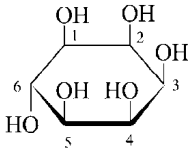
P-104.2 TWORZENIE NAZW

Istnieją różne zalecane metody tworzenia nazw cyklitoli.

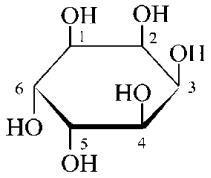
P-104.2.1 Stereoizomeryczne inozytole opisuje się dodając do nazwy ‘inozytol’pisane kursywą przedrostki. W przedstawionej metodzie numery pozycji zapisuje się w nawiasach okrągłych. Preferowane są nazwy z przedrostkami.



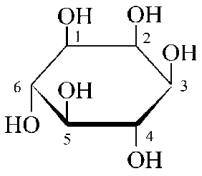
cis-inozytol
(1,2,3,4,5,6/0-)



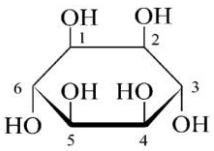
epi-inozytol
(1,2,3,4,5/6-)



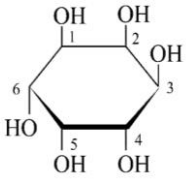
allo-inozytol
(1,2,3,4/5,6-)



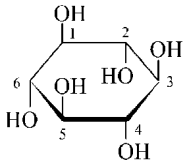
mio-inozyto
(1,2,3,5/4,6-)



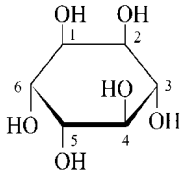
muko-inozytol
(1,2,4,5/3,6-)



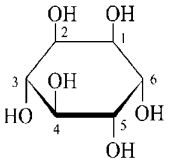
neo-inozyt
(1,2,3/4,5,6-)



scyllo-inozytol
(1,3,5/2,4,6-)



1L-*chiro*-inozytol
(1,2,4/3,5,6-)
[dawniej L-*chiro*-inozytol
lub (-)-inozytol]

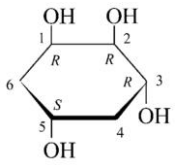


1D-*chiro*-inozytol
(1,2,4/3,5,6-)
[dawniej D-*chiro*-inozytol
lub (+)-inozytol]

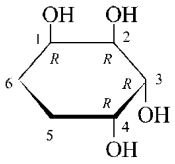
Konfigurację absolutną cyklitoli oznacza się jako 'D' lub 'L' i określa się ją w następujący sposób. W płasko przedstawionym pierścieniu cyklitolu, w którym grupa hydroksylowa przy atomie węgla oznaczonym numerem '1' jest powyżej płaszczyzny pierścienia, konfiguracja 'L' odpowiada numeracji atomów węgla w pierścieniu zgodnej z ruchem wskazówek zegara podczas gdy konfiguracja 'D' odpowiada numeracji atomów węgla przeciwnej do ruchu wskazówek zegara jak to ilustrują powyżej dwa enancjomeryczne *chiro*-inozytole. Stereodeskryptory 'D' i 'L' wraz z występującym po nim myślnikiem zapisuje się przed nazwą związku i poprzedza numerem lokantu definiującego centrum chiralności np. '1' jak pokazano powyżej.

P-104.2.2 Nazwy cyklitoli, z wyjątkiem inozytolu, tworzy się systematycznie wychodząc z cykloheksanu jako macierzystej struktury. Do opisu stereoizomerów stosuje się metodę CIP i jej reguły sekwencji. Ta metoda jest preferowana względem pozycyjnej numeracji opisanej w P-104.2.3.

Przykłady:



(1*R*,2*R*,3*R*,5*R*)-cykloheksano-1,2,3,5-tetraol



(1*R*,2*R*,3*R*,4*R*)-cykloheksano-1,2,3,4-tetraol

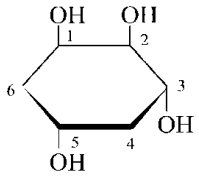
P-104.2.3 Lokanty są przypisane do grup hydroksylowych w cyklitolach, tak więc kierunek numerowania jest opisany w odniesieniu do przestrzennych relacji i charakteru podstawników występujących w pierścieniu. Podstawniki występujące powyżej płaszczyzny pierścienia stanowią

jeden zbiór. a znajdujące się poniżej płaszczyzny pierścienia drugi zbiór. Najniższe lokanty odnoszą się do jednego zbioru podstawników zgodnie z przedstawionymi poniżej kryteriami, które stosuje się kolejno aż do rozstrzygnięcia:

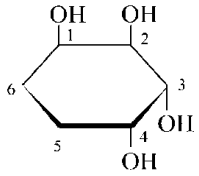
(a) do podstawników traktowanych jako numeryczna seria bez względu na konfigurację;
(b) jeżeli jeden zbiór podstawników jest liczniejsza od drugiego, do bardziej licznego;
(c) jeżeli zbiory są jednakowo liczne i jeden z nich może być oznaczony niższymi numerami, to do tego zbioru;
(d) do podstawników innych niż niezmodyfikowane grupy hydroksylowe;
(e) do podstawnika wymienianego jako pierwszy w porządku alfanumerycznym;
(f) do tych oznaczeń, które prowadzą do ‘L’ a nie ‘D’ konfiguracji jak to określa metoda opisana powyżej w P-104.2.1 (dotyczy wyłącznie związków *mezo*).

Numery pozycji są opisane przez wyrażenie, w którym licznik jest zbiorem podstawników o najniższych lokantach, ułożonymi w kolejności rosnącej, a mianownikiem jest drugi zbiór podstawników.

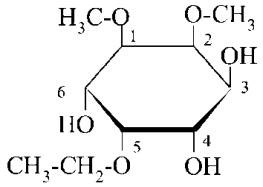
Przykłady:



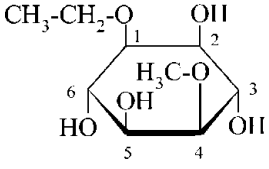
1L-1,2/3,5-cykloheksanotetraol [kryterium (a) i (c)]
(1*R*,2*R*,3*R*,5*R*)-cykloheksano-1,2,3,5-tetraol



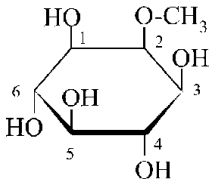
1L-1,2/3,4-cykloheksanotetraol [kryterium (a)]
(1*R*,2*R*,3*R*,4*R*)-cykloheksano-1,2,3,4-tetraol



1 L-5-*O*-etylo-1,2-di-*O*-metylo-*neo*-inozytol [kryterium (d)]



1 L-1-*O*-etylo-4-*O*-metylo-*muko*-inozytol [kryterium (d) i (e)]



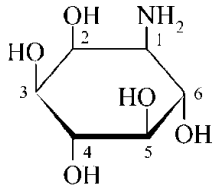
2-*O*-metylo-*mio*-inozytol [kryterium (b) i (f)]

P-104.3 POCHODNE CYKLITOLI

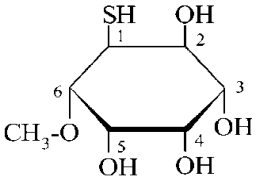
P-104.3.1 Pochodne inozytoli

Do utworzenia nazw pochodnych inozytole modyfikuje się w taki sam sposób jak węglowodany. Nie ma żadnych ograniczeń jeśli chodzi o *O*-substytucję grupami alkilowymi (arylowymi) (patrz P-102.5.6.1). Grupy hydroksylowe mogą być wymieniane na grupy aminowe stosując operację 'deoksy' (patrz P-102.5.4). Kiedy grupy charakterystyczne o wyższym starszeństwie od grup hydroksylowych są wstawiane w ich miejsce, muszą zostać utworzone nazwy w pełni podstawnikowe. Jednakże estry są nazywane alkanianami/karboksylanami. Numeracja inozytolu pozostaje bez zmian i konfiguracja jest określana stereodeskryptorami 'L' lub 'D'.

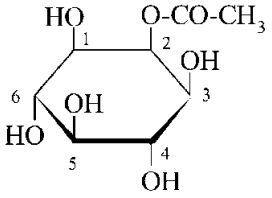
Przykłady:



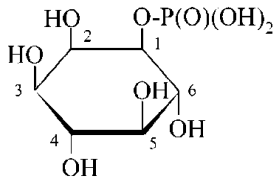
1D-1-amino-1-deoksy-*mio*-inozytol



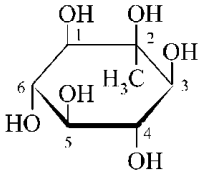
1L-1-deoksy-6-*O*-metylo-1-sulfanylo-*allo*-inozytol
(nie 1L-6-*O*-metylo-1-tio-*allo*-inozytol)
(1*S*,2*R*,3*S*,4*S*,5*S*,6*S*)-5-metoksy-6-sulfanylocyklo-heksano-1,2,3,4-tetraol



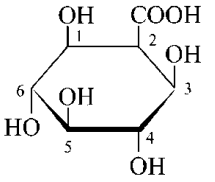
2-octan *mio*-inozytolu
(nazwy estrów węglowodanów patrz P-102.5.6.1.1)



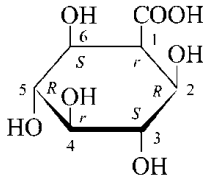
1-(fosforan diwodoru) 1D-*mio*-inozytolu



2-metylo-*mio*-inozytol
(1*s*,2*R*,3*S*,4*s*,5*R*,6*S*)-1-metylocykloheksano-1,2,3,4,5,6-heksaol



I



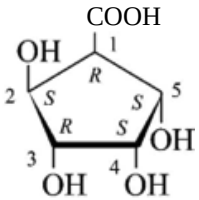
II

I 2-karboksy-2-deoksy-*mio*-inozytol
II kwas (1*r*,2*R*,3*S*,4*r*,5*R*,6*S*)-2,3,4,5,6-pentahydroksycykloheksano-1-karboksylowy

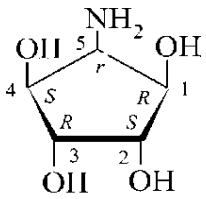
P-104.3.2 Pochodne cyklitoli inne niż inozytole

Nazwy pochodnych cyklitoli innych niż inozytol konstruuje się w oparciu o zasady, reguły i konwencje nomenklatury podstawnikowej opisane w rozdziałach od P-1 do P-9.

Przykłady:



kwas (1*R*,2*S*,3*R*,4*S*,5*S*)-2,3,4,5-tetrahydroksycyklopentano-1-karboksylowy



(1*R*,2*S*,3*R*,4*S*,5r)-5-aminocyklopentano-1,2,3,4-tetraol

P-105 NUKLEOZYDY

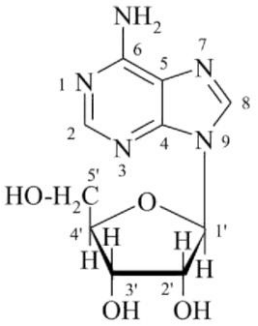
P-105.0 Wprowadzenie
P-105.1 Zachowane nazwy nukleozydów
P-105.2 Podstawienie nukleozydów

P-105.0 WPROWADZENIE

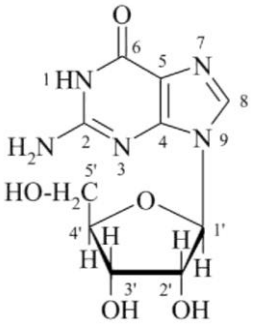
Nomenklatura nukleozydów jest zilustrowana w dokumencie zatytułowanym „Abbreviations and Symbols for Nucleic Acids, Polynucleotides and their Constituents” (lit. 47). Procedury nazywania pochodnych przedstawione w tym rozdziale są zgodne z zasadami opisanymi w rozdziale P-102, dotyczącymi modyfikacji w pierścieniu węglowodanowym oraz z ogólnymi regułami podstawienia związków organicznych.

P-105.1 ZACHOWANE NAZWY NUKLEOZYDÓW

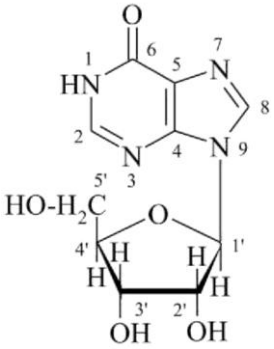
Poniższe nazwy są zachowane.



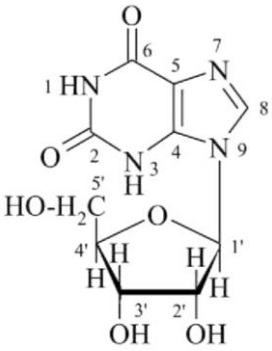
adenozyna



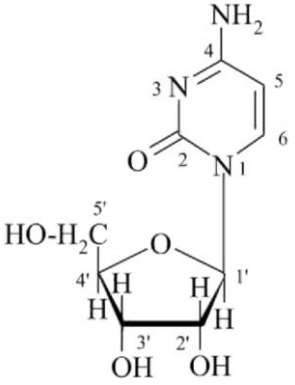
guanozyna



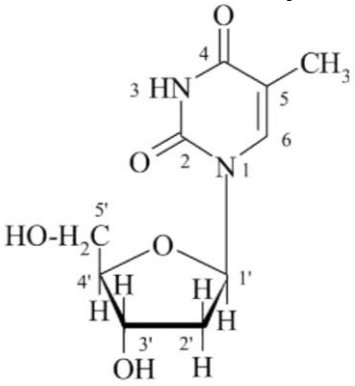
inozyna



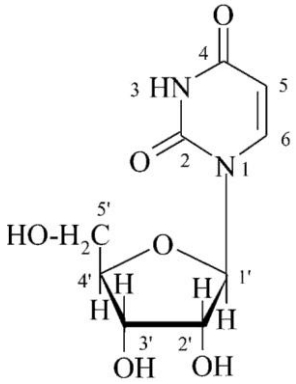
ksantozyna



cytydyna



tymidyna

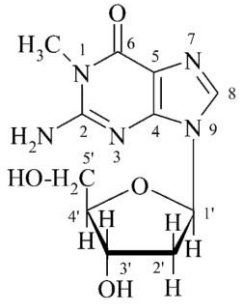


urydyna

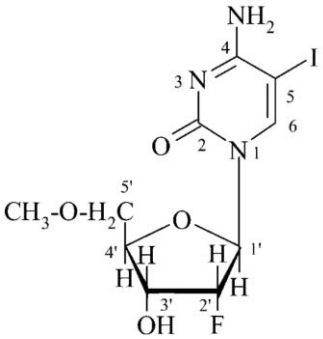
P-105.2 PODSTAWIENIE NUKLEOZYDÓW

P-105.2.1 Nukleozydy, które mają zachowane nazwy mogą być w pełni podstawiane w pierścieniu purynowym lub pirymidynowym. Zamianę grup okso w nukleozydach opisuje się za pomocą przedrostków zamiennych funkcji. Składnik rybofuranozylowy można modyfikować zgodnie z zasadami opisanymi dla węglowodanów (patrz P-102.5).

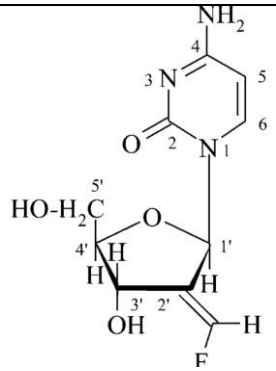
Przykłady:

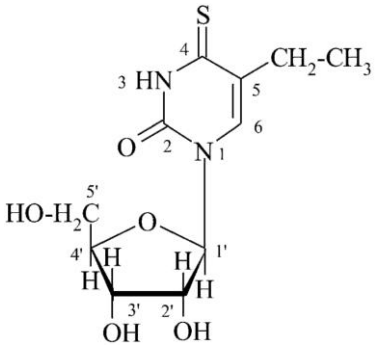


2′-deoksy-1-metyloguanozyna

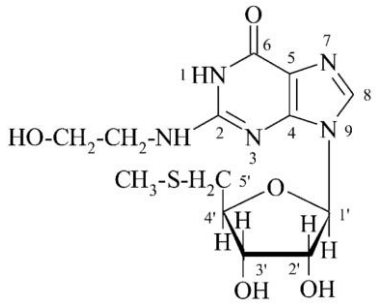


2′-deoksy-2′-fluoro-5-jodo-5′-*O*-metylocytydyna
(zastąpienie grupy hydroksylowej przez atom fluoru w tej samej pozycji jest dozwolone)
4-amino-1-[(2*R*,3*R*,4*R*,5*R*)-3-fluoro-4-hydroksy-5-(metoksymetylo)oksolan-2-ylo]-5-jodopirymidyn-2(1*H*)-on

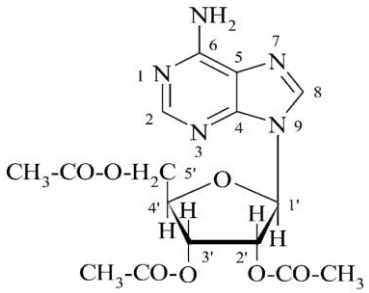
	(2*E*')-2'-deoksy-2'-(fluorometylideno)cytydyna 4-amino-1-[(2*R*,3*E*,4*S*,5*R*)-3-(fluorometylideno)-4-hydroksy-5-(hydroksymetylo)oksolan-2-ylo]pirymidyn-2(1*H*)-on



5-etylo-4-tiourydyna



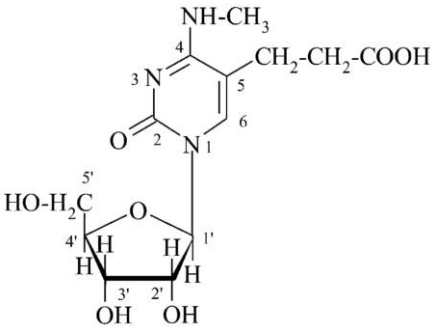
N-(2-hydroksyetylo)-5′-*S*-metylo-5′-tioguanozyna



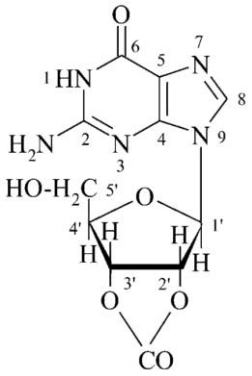
2′,3′,5′-tri-*O*-acetyloguanozyna
2′,3′,5′-trioctan guanozyny

P-105.2.2 W obecności grup charakterystycznych o wyższym priorytecie niż pseudoketon, stosuje się zwykłe zasady nomenklatury podstawnikowej.

Przykłady:



kwas 3-[4-(metyloamino)-2-okso-1-β-D-rybofuranolilo-1,2-dihydropirymidyn-5-ylo]propanowy



karbonian 2′3′-dideoksyguanozyno-2′,3′-diylu (patrz P.101.7.4)
cykliczny-2′,3′-karbonian guanozyny

P-106 NUKLEOTYDY

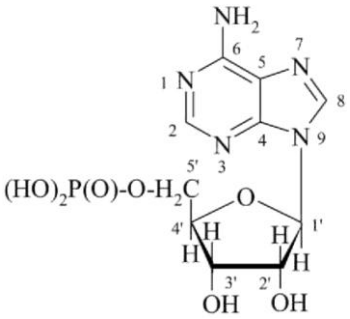
P-106.0 Wprowadzenie
P-106.1 Zachowane nazwy
P-106.2 Difosforany i trifosforany nukleotydów
P-106.3 Pochodne nukleotydów

P-106.0 WPROWADZENIE

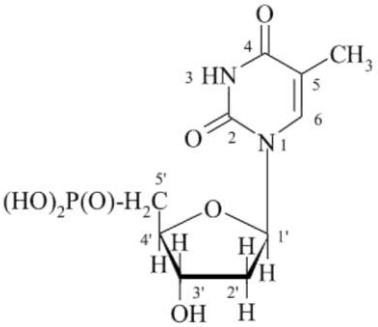
Nazwy nukleotydów są zilustrowane w dokumencie zatytułowanym „Abbreviations and Symbols for Nucleic Acids, Polynucleotides and their Constituents” (lit. 47). Procedury nazywania pochodnych przedstawionych w tym rozdziale są zgodne z zasadami opisanymi w rozdziale P-102, dotyczącymi modyfikacji na pierścieniu węglowodanowym oraz z ogólnymi regułami podstawienia związków organicznych.

P-106.1 ZACHOWANE NAZWY

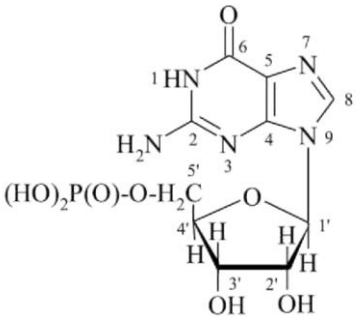
Poniżej przedstawiono zwyczajowe nazwy estrów nukleozydów z kwasem fosforowym. Primowany lokant składnika rybofuranozylowego umieszcza się w celu wskazania pozycji grupy fosforanowej.



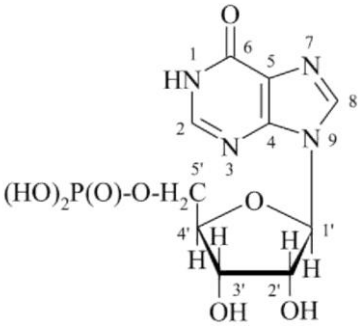
kwas 5'-adenylowy



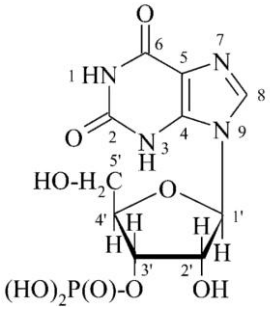
kwas 5'-tymidylowy



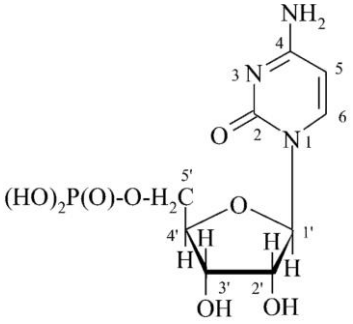
kwas 5'-guanylowy



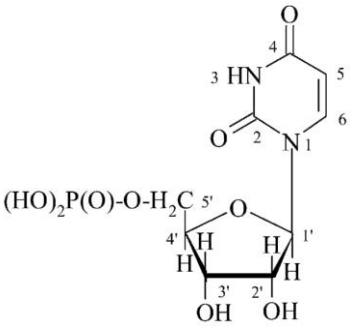
kwas 5'-inozynowy



kwas 3'-ksantylowy



kwas 5'-cytydylowy

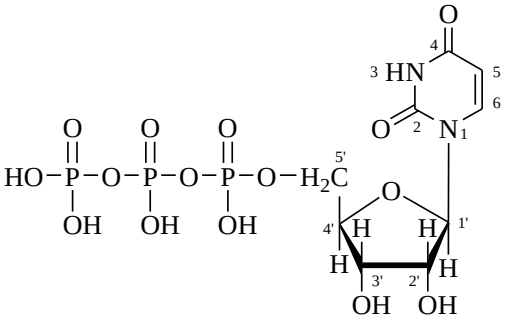


kwas 5'-urydylowy

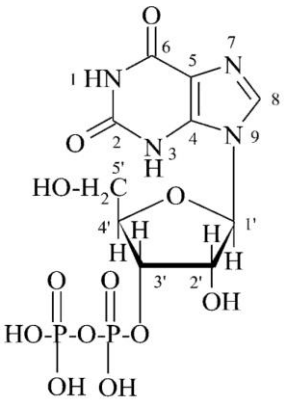
P-106.2 DIFOSFORANY I TRIFOSFORANY NUKLEOTYDÓW

Difosforan, trifosforan itp. estry nukleozydów nazywa się wymieniając określenie jak np. difosforan przed nazwą nukleozydu. Obecność atomów wodoru w difosforanowym, trifosforanowym itp. składniku nukleotydu wskazuje się przez dodanie słowa 'wodoru', 'diwodoru' itd. Aby uniknąć dwuznaczności stosuje się nawiasy

Przykłady:



5'-(trifosforan tetrawodoru) urydyny

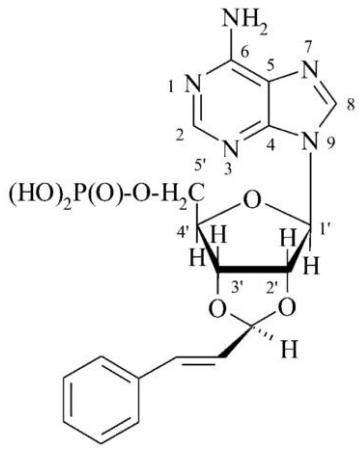


3'-(difosforan triwodoru) ksantozyny

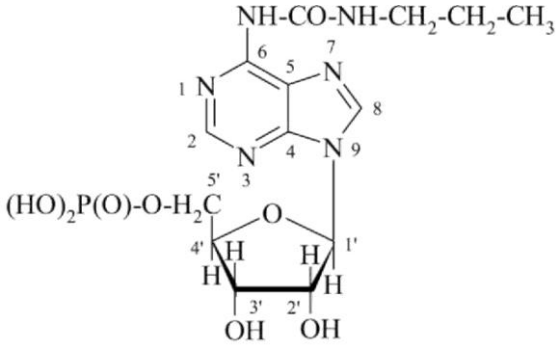
P-106.3 POCHODNE NUKLEOTYDÓW

P-106.3.1 Pochodne nukleotydów mającuch zachowane nazwy nazywa się w ten sam sposób jak odpowiednie nukleozydy, tj. mogą być w pełni podstawiane w pierścieniu purynowym lub pirymidynowym i reszta rybofuranozylowa może być modyfikowana zgodnie z zasadami opisanymi dla węglowodanów (patrz P-102.5). Stosuje się również 2- i 3-deoksy modyfikowane reszty rybozy.

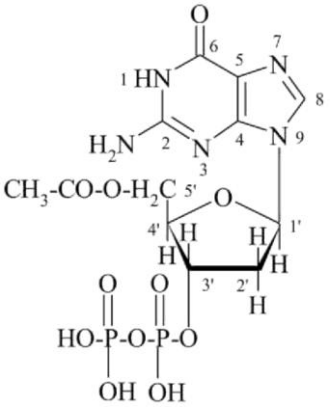
Przykłady:



kwas 2′,3′-*O*-[(1*S*,2*E*)-3-fenyloprop-2-eno-1,1-diylo]-5′-adenylowy



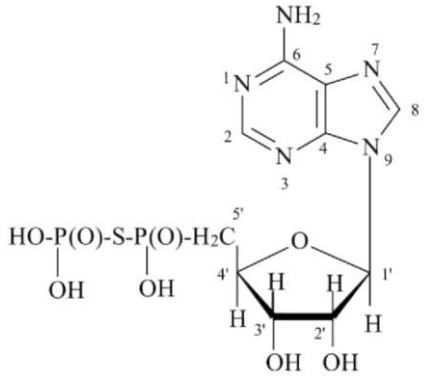
kwas N^6-(propylokarbamoilo)-5′-adenylowy



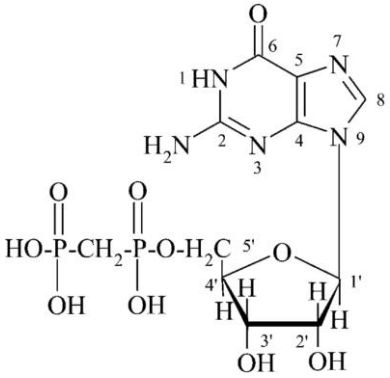
3′-(difosforan triwodoru) 5′-*O*-acetylo-2′-deoksyguanozyny
3′-(difosforan triwodoru)-5′-octan 2′-deoksyguanozyny

P-106.3.2 Analogi di- i polifosforanów nukleozydów można nazywać metodami zamiany funkcji mających zastosowanie do kwasów di- i polifosforowych (patrz P-67.2).

Przykłady:



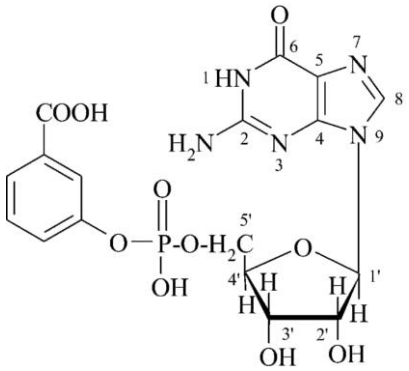
5′-(2-tiodifosforan triwodoru) adenozyny



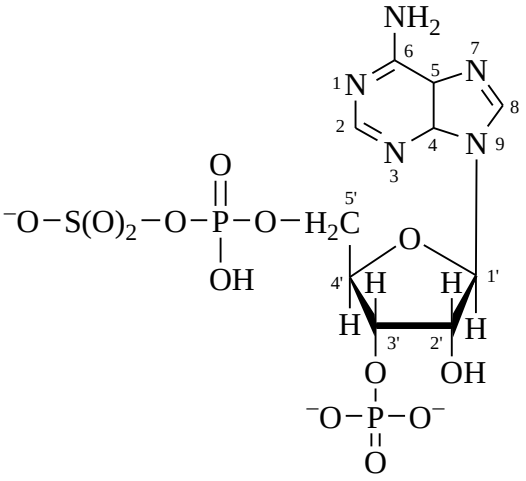
5′-[(fosfonometylo)fosfonian wodoru] guanozyny
5′-(metylenodifosfonian triwodoru) guanozyny
5′-(2-karbadifosforan triwodoru) guanozyny
(ta nazwa zachowuje integralność nazw nukleotydu; patrz P.101.4.3)

P-106.3.3 W obecności grup charakterystycznych o wyższym priorytecie niż reszta kwasu fosforowego, stosuje się zwykłe zasady nomenklatury podstawnikowej. Nazwy przedrostków podstawnikowych wywodzi się z nazw zwyczajowych monofosforanów nukleotydów pomijając słowo ‘kwas’ i zamieniając końcówkę ‘-owy’ na ‘-ilo’ np. adenylilo, cytydylilo. Należy zwrócić uwagę, że nazwa przedrostka podstawnikowego wywodząca się od kwasu inozynowego jest wyjątkiem; nazywany jest inozynylil, tak że końcówka jest jak inne przedrostki podstawnikowe wywodzące się z nazw zwyczajowych monofosforanów nukleotydów.

Przykłady:



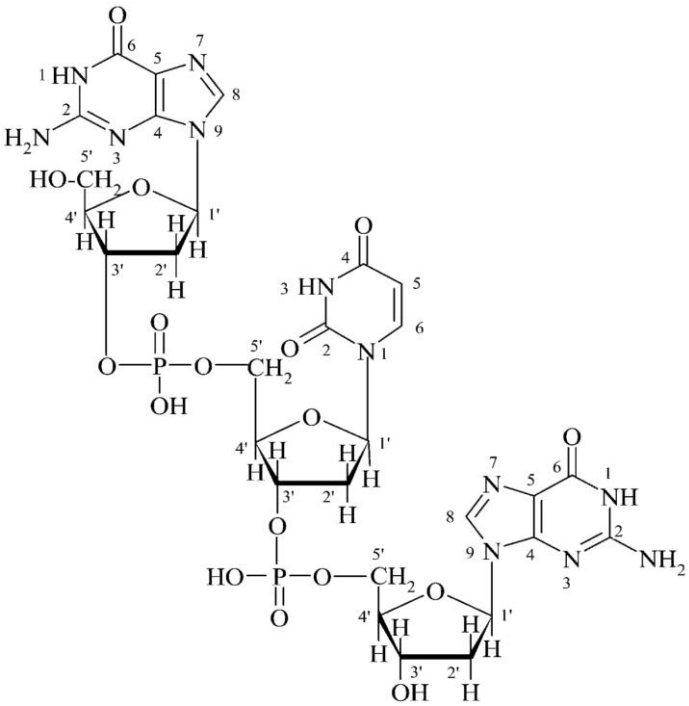
kwas 3-(5′-guanyliloksy)benzoesowy



siarczan 3′-*O*-fosfoniano-5′-adenylilu
siarczan 3′-fosfo-5′-adenylilu

P-106.3.4 Nazwy oligonukleotydów tworzy się używając przedrostków wywodzących się z nazw zwyczajowych nukleotydów.

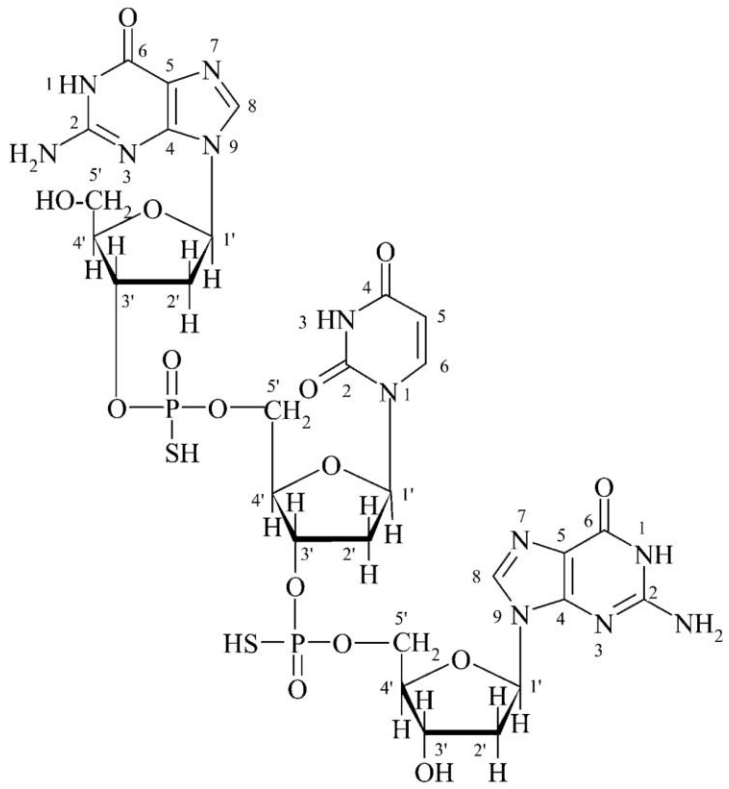
Przykład:



2′-deoksyguanylilo-(3′→5′)-2′-deoksy-urydylilo- (3′→5′)-2′-deoksyguanozyna

P-106.3.5 Gdy obecny jest kwas fosforotiowy (HS-P w miejscu HO-P), to przed nazwą nukleotydu dodaje się przedrostek *P*-tio.

Przykład:



2'-deoksy-*P*-tioguanylilo-(3'→5')-2'-deoksy-*P*-tiourydylilo-(3'→5')-2'-deoksyguanozyna

P-107 LIPIDY

P-107.0 Wprowadzenie
P-107.1 Definicje
P-197.2 Glicerydy
P-107.3 Kwasy fosfatydowe
P-107.4 Glikolipidy

P-107.0 WPROWADZENIE

Nomenklatura lipidów, fosfolipidów i glikolipidów została opublikowana w 1976 r. (lit. 48); nomenklatura glikolipidów została zaktualizowana w 1997 r. (lit. 50).

P-107.1 DEFINICJE

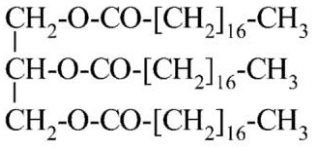
‘Lipidy’ są luźno zdefiniowanym terminem dla substancji pochodzenia biologicznego, które są rozpuszczalne w niepolarnych rozpuszczalnikach. Do lipidów należą substancje, które ulegają zmydleniu, jak np. ‘glicerydy′ (tłuszcze i oleje)’ i ‘fosfolipidy’, jak również substancje niezmydlające się, w szczególności ‘steroidy’.

Nomenklatura lipidów, podobnie jak węglowodanów, składa się z zachowanych nazw i nazw systematycznych, tworzonych w ramach specjalistycznej nomenklatury lipidów. W nomenklaturze lipidów zachowana jest nazwa ‘sfinganina’ dla ‘(2*S*,3*R*)-2-aminooktadekano-1,3-diolu’ i jego pochodnych.

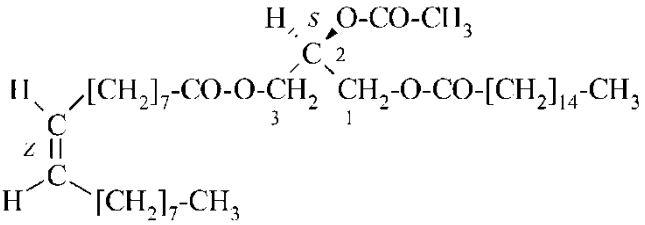
P-107.2 GLICERYDY

Glicerydy są estrami glicerolu (propano-1,2,3-triolu) z kwasami tłuszczowymi. Od dawna są one zwyczajowo podzielone na triglicerydy, 1,2- lub 1,3-diglicerydy i 1- lub 2-monoglicerydy, w zależności od liczby i pozycji grup acylowych. Poszczególne glicerydy są nazywane mono-, di- lub tri-*O*-acyloglicerolami. Stosowanie nazwy glicerol jest dozwolone w ogólnej nomenklaturze związków organicznych. Nazwa ta jest także zachowana w nomenklaturze produktów naturalnych, zwłaszcza lipidów.

Przykłady:



tri-*O*-oktadekanoiloglicerol
trioktadekanian propano-1,2,3-triolu



(2*S*)-2-*O*-acetylo-1-*O*-heksadekanoilo-3-*O*-(9*Z*)-oktadec-9-enoiloglicerol
(numeracja pokazana)
(2*S*)-2-*O*-acetylo-1-*O*-oleinoilo-3-*O*-palmitoiloglicerol
1-heksadekanian 2-octan 3-[(9*Z*)-oktadec-9-enian] (2*S*)-propano-1,2,3-triylu

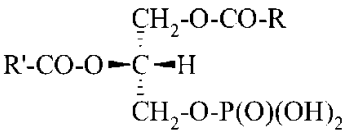
Fosfolipidy są lipidami zawierającymi kwas fosforowy w postaci mono- lub diestrów, łącznie z ‘kwasami fosfatydowymi’ i ‘fosfoglicerydami’.

Kwasy fosfatydowe są pochodnymi glicerolu w którym jedna grupa hydroksylowa, zazwyczaj ale niekoniecznie pierwszorzędowa, jest zestryfikowana kwasem fosforowym, a pozostałe dwie grupy hydroksylowe są zestryfikowane kwasami tłuszczowymi.

Fosfoglicerydy są fosforowymi diestrami, estrami kwasu fosfatydowego, w których zestryfikowanym alkoholem, na ogół posiadającym grupę polarną (-OH lub NH_2), jest zazwyczaj 2-aminoetanol (nie ‘etanoloamina’), cholina, glicerol, inozytol lub seryna. Termin ten obejmuje ‘lecytyny’ i ‘kefaliny’.

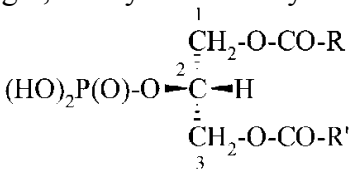
P-107.3 KWASY FOSFATYDOWE

P-107.3.1 Ogólna struktura kwasów fosfatydowych jest następująca:



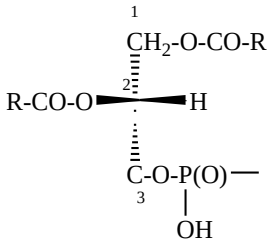
kwas 3-*sn*-fosfatydowy
(omówienie i przykłady zastosowania ‘*sn*’ patrz P-107.3.2)

Na ogół, kwasy 3-*sn*-fosfatydowe nazywa się po prostu kwasami fosfatydowymi.



kwas 2-fosfatydowy

Monowalencyjna grupa acylowa ma zachowaną nazwę‘fosfatydyl’.



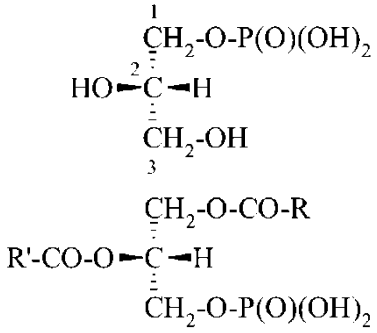
fosfatydyl

P-107.3.2 Konfiguracja kwasów fosfatydowych

W celu określenia konfiguracji absolutnej pochodnych glicerolu, atomy węgla glicerolu numerowane są metodą zwaną ‘stereospecyficzną numeracją’. Atom węgla, znajdujący się u góry w projekcji Fischera, w której łańcuch węglowy zapisuje się pionowo, oznacza się jako C-1, jeśli grupa hydroksylowa przy atomie węgla 2 jest rzutowana na lewo.

W celu odróżnienia tej numeracji od numeracji tradycyjnej, która nie przedstawia relacji przestrzennych, stosowany jest stereodeskryptor ‘*sn*’ (dla ‘stereospecyficznej numeracji’). Deskryptor ten umieszcza się z łącznikiem bezpośrednio przed słowem glicerol i zapisuje kursywą, małymi literami, nawet na początku zdania. Racematy oznacza się stereodeskryptorem ‘*rac*’, a stereodeskryptor ‘*X*’ może być stosowany jeśli konfiguracja związku jest nieznana lub nieokreślona.

Przykłady:



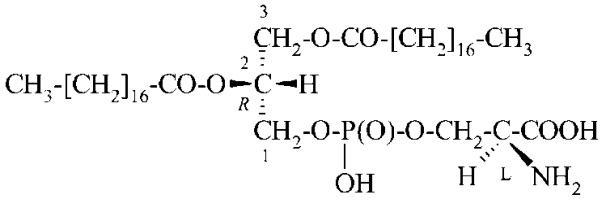
1-fosforan *sn*-glicerolu
fosforan diwodoru (2*S*)-2,3-dihydroksypropylu

3-fosforan *sn*-glicerolu
fosforan diwodoru (2*R*)-2,3-dihydroksypropylu

P-107.3.3 Fosfatydyloseryny

Termin ‘fosfatydyloseryny’ jest stosowany w celu opisania pochodnych kwasów fosfatydowych, w których reszta fosforanowa jest zestryfikowana aminokwasem ‘seryną’, zazwyczaj L-seryną. Semi-systematyczne nazwy określonych związków tworzy się zgodnie z zasadami, regułami i konwencjami nomenklatury podstawnikowej.

Przykład:

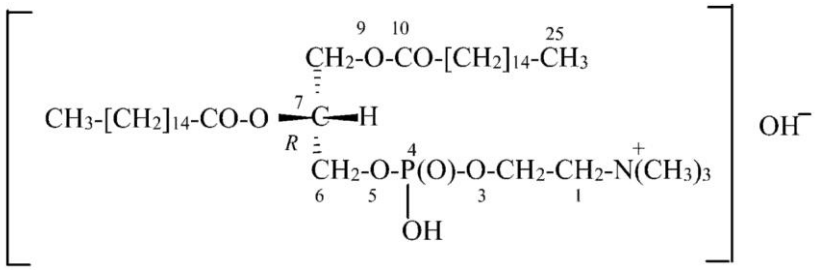


1,2-di(oktadekanoilo)-*sn*-glicero-3-fosfo-L-seryna
O-{[(2*R*)-2,3-di(oktadekanoiloksy)propoksy]hydroksyfosforylo}-L-seryna

P-107.3.4 Fosfatydylocholiny

Termin ‘fosfatydylocholiny’ jest stosowany w celu opisania pochodnych kwasów fosfatydowych, w których reszta fosforanowa jest zestryfikowana choliną. Semi-systematyczne nazwy określonych związków tworzy się zgodnie z zasadami, regułami i konwencjami nomenklatury podstawnikowej.

Przykład:

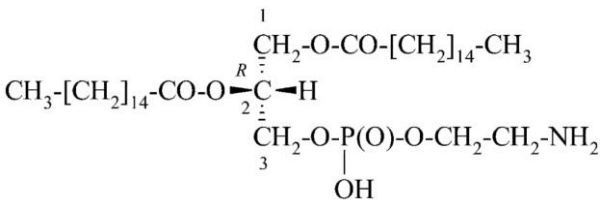


wodorotlenek (7*R*)-7-(heksadekanoiloksy)-4-hydroksy-*N*,*N*,*N*-trimetylo-4,10-diokso-3,5,9-trioksa-4λ^5-fosfapentakozano-1-aminium

P-107.3.5 Fosfatydyloetanoloaminy

Termin ‘fosfatydyloetanoloaminy’ [bardziej poprawnie określane jako ‘fosfatydylo(amino) etanole’] jest stosowany w celu opisania pochodnych kwasów fosfatydowych, w których reszta fosforanowa jest zestryfikowana 2-aminoetanolem. Semi-systematyczne nazwy określonych związków tworzy się zgodnie z zasadami, regułami i konwencjami nomenklatury podstawnikowej.

Przykład:

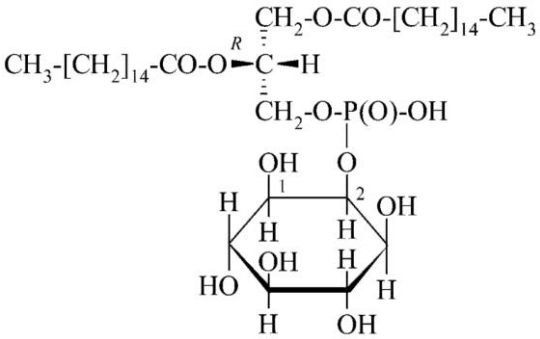


1,2-di(heksadekanoilo)-*sn*-glicero-3-fosfoetanoloamina
diheksadekanian (2*R*)-3-{[(2-aminoetoksy)hydroksyfosforylo]oksy}propano-1,2-diylu

P-107.3.6 Fosfatydyloinozytole

Termin ‘fosfatydyloinozytole’ jest stosowany w celu opisania pochodnych kwasów fosfatydowych, w których reszta fosforanowa jest zestryfikowana cząsteczką inozytolu. Semi-systematyczne nazwy określonych związków tworzy się zgodnie z zasadami, regułami i konwencjami nomenklatury podstawnikowej.

Przykład:



2-[fosforan wodoru (2*R*)-2,3-bis(heksadekanoiloksy)propylu] L-*mio*-inozytolu diheksadekanian (2*R*)-3-[(hydroksy{[(1*s*,2*R*,3*R*,4*s*,5*S*,6*S*)-2,3,4,5,6-pentahydroksy-cykloheksylo]oksy}fosforylo)oksy]propano-1,2-diylu

P-107.4 GLIKOLIPIDY

P-107.4.1 Definicje

Określenie ‘glikolipid’ oznacza każdy związek zawierający jedną lub większą liczbę reszt monosacharydowych połączonych wiązaniem glikozydowym z ugrupowaniem hydrofobowym, takim jak acyloglicerol, sfingoid (długołańcuchowy alifatyczny aminoalkohol), ceramid (*N*-acylosfingoid) lub prenylofosforan.

Glikoglicerolipidy są glikolipidami zawierającymi jedną lub większą liczbę reszt glicerolu.

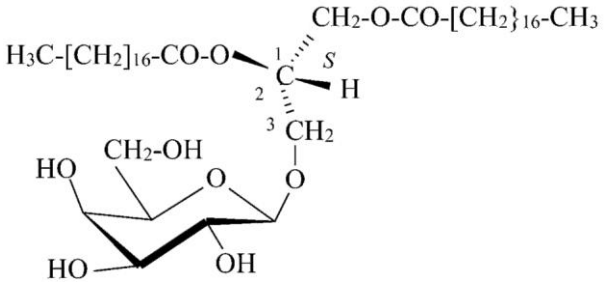
Glikosfingolipidy oznaczają lipidy zawierające co najmniej jedną resztę monosacharydową i sfingoid lub ceramid.

Określenie ‘glikofosfatydyloinozytol’ oznacza glikolipidy zawierające cukry połączone glikozydowo z resztą inozytolu będącego składnikiem fosfatydyloinozytoli.

Określone związki nazywa się systematycznie.

P-107.4.2 Glikoglicerolipidy

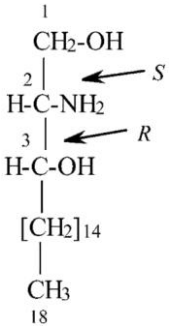
Określone związki nazywane są na podstawie macierzystego glicerolu; ich konfiguracja jest specyficznie numerowana jak pokazano w P-107.3.2.



3-*O*-β-D-galaktopiranozylo-1,2-di-*O*-oktadekanoilo-*sn*-glicerol
dioktadekanian (2*S*)-3-(β-D-galaktopiranozyloksy)propano-1,2-diylu

P-107.4.3 Glikosfingolipidy

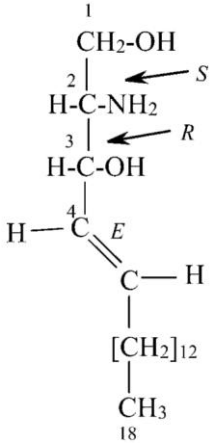
P-107.4.3.1 Nazwy glikosfingolipidów tworzone są przez zastosowanie zachowanej nazwy ‘sfinganina’ dla alifatycznego aminoalkoholu mającego określoną konfigurację absolutną. Zachowana nazwa ‘sfinganina’ jest preferowana dla związku o nazwie systematycznej (2*S*,3*R*)-2-aminooktadekano-1,3-diol.



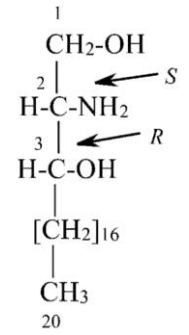
sfinganina
(2*S*,3*R*)-2-aminooktadekano-1,3-diol

Zachowana nazwa ‘sfinganina’ jest stosowana do tworzenia nazw nienasyconych i *N*-podstawionych pochodnych jak i pochodnych *O*-podstawionych. Inne pochodne, takie jak hydroksy, okso i aminopochodne jak również izomery o innej długości łańcucha lub inne diastereoizomery nazywa się systematycznie w oparciu o zasady, reguły i konwencje nomenklatury podstawnikowej.

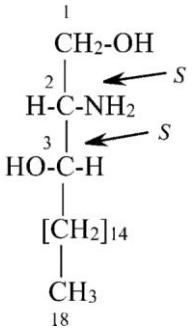
Przykłady:



(4*E*)-sfing-4-enina
(2*S*,3*R*,4*E*)-2-aminooktadec-4-eno-1,3-diol



ikozasfinganina
(2*S*,3*R*)-2-aminoikozano-1,3-diol

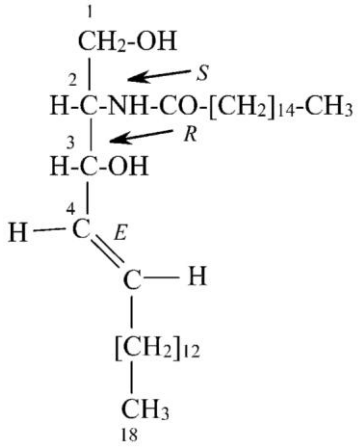


(2*S*,3*S*)-2-aminooktadekano-1,3-diol

P-107.4.3.2 Ceramidy

Ceramidy są *N*-acylosfingoidami.

Przykład:

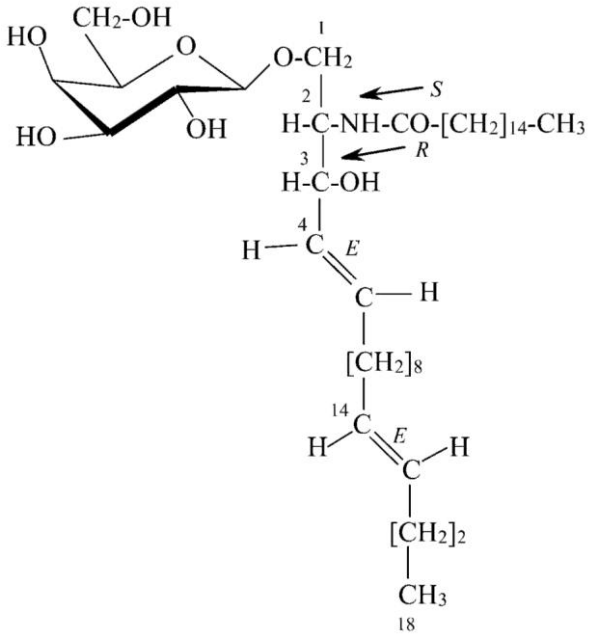


(4*E*)-*N*-heksadekanoilosfing-4-enina
N-[(2*S*,3*R*,4*E*)-1,3-dihydroksyoktadec-4-en-2-ylo]heksadekanoamid

P-107.4.3.3 Obojętne glikosfingolipidy

Obojętny glikosfingolipid jest pochodną sfingoidu lub ceramidu zawierającą resztę węglowodanową. Uznaje się, że reszta węglowodanowa przyłączona jest wiązaniem glikozydowym do 1-*O*-. Preferowane nazwy systematyczne muszą zawierać wszystkie lokanty.

Przykład:



(4*E*,14*E*)-1-*O*-(β-D-galaktopiranozylo)-*N*-heksadekanoilosfinga-4,14-dienina
N-[(2*S*,3*R*,4*E*,14*E*)-1-(β-D-galaktopiranozyloksy)-3-hydroksyoktadeka-4,14-dien-2-ylo]heksadekanoamid

ZAŁĄCZNIK I

Lista, w porządku malejącego starszeństwa, pierwiastków i członów ‘a’ używanych w nomenklaturze zamiennej ‘a’ szkieletu

Pierwiastek	Człon ‘a’	Pierwiastek	Człon ‘a’
F	fluora	Cu	kupra
Cl	chlora	Ag	argenta
Br	broma	Au	aura
I	joda	Rg	roentgena
At	asta	Ni	nikela
O	oksa	Pd	pallada
S	tia	Pt	platyna
Se	selena	Ds	darmstadta
Te	tellura	Co	kobalta
Po	polona	Rh	roda
Lv	liwermora	Ir	iryda
N	aza	Mt	meitnera
P	fosfa	Fe	ferra
As	arsa	Ru	rutena
Sb	stiba	Os	osma
Bi	bizma	Hs	hassa
C	karba	Mn	mangana
Si	sila	Te	techneta
Ge	germa	Re	rena
Sn	stanna	Bh	bohra
Pb	plumba	Cr	chroma
Fl	flerowa	Mo	molibda
B	bora	W	tungsta
Al.	alumina	Sg	seaborga
Ga	galla	V	wanada
In	inda	Nb	nioba
Tl	talla	Ta	tantala
Zn	cynka	Db	dubna
Cd	kadma	Ti	tytana
Hg	merkura	Zr	cyrkona
Cn	kopernika	Hf	hafna
Rf	rutherforda	Bk	berkela
Sc	skanda	Cf	kaliforna
Y	itra	Es	einsteina
La	lantana	Fm	ferma
Ce	cera	Md	mendelewa
Pr	praseodyma	No	nobela
Nd	neodyma	Lr	lawrenca
Pm	prometa	Be	beryla
Sm	samara	Mg	magneza
Eu	europa	Ca	kalka
Gd	gadolina	Sr	stronta

Pierwiastek	**Człon ‘a’**	**Pierwiastek**	**Człon ‘a’**
Tb	terba	Ba	bara
Dy	dysproza	Ra	rada
Ho	holma	Li	lita
Er	erba	K	potasa
Tm	tula	Na	soda
Yb	iterba	Rb	rubida
Lu	luteta	Cs	ceza
Ac	aktyna	Fr	franka
Th	tora	He	hela
Pa	protaktyna	Ne	neona
U	urana	Ar	argona
Np.	neptuna	Kr	kryptona
Pu	plutona	Xe	ksenona
Am	ameryka	Rn	radona
Cm	kiura		

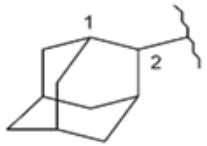
ZAŁĄCZNIK 2

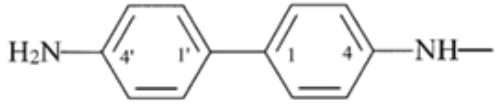
Rozłączne przedrostki używane w nomenklaturze podstawnikowej

Symbol* oznacza preferowany przedrostek (na przykład: acetamido* =acetyloamino; acetyloamino = acetamido*) albo wstępnie wybrany przedrostek (na przykład: sulfanyl* = tio).

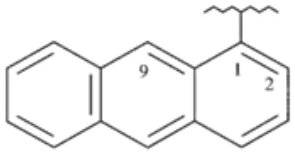
Po przedrostkach, które nie są zalecane występuje wzmianka ‘patrz’ a za nią preferowany lub wstępnie wybrany przedrostek (na przykład: ‘chloroksy: patrz chloryl*’. Dla pozycji ‘chloroksy’ nie podaje się wzoru. Jako odpowiednik, po preferowanym albo wstępnie wybranym przedrostku pojawia się wzmianka ‘nie’i przedrostek, który nie jest zalecany ujęte w odpowiednie nawiasy (na przykład chloryl* (nie chloroksy).

Nazwa	Wzór	Reguła(y)
acetoamido* = acetyloamino	CH_3-CO-NH-	P-66.1.1.4.3
acetohydrazyd* = 2-acetylohydrazyn-1-yl	CH_3-CO-NH-NH-	P-66.3.2.3
acetohydrazonoil = etanohydrazonoil* = 1-hydrazynylidenoetyl	CH_3-C(=N-NH_2)-	P-65.1.7.2.2
acetohydroksymoil = *N*-hydroksyetanoimidoil* = *N*-hydroksyacetoimidoil	CH_3-C(=N-OH)-	P-65.1.7.2.2
acetoimidoamido = etanoimidoamido* = acetoimidoiloamino	CH_3-C(=NH)-NH-	P-66.4.1.3.5
acetoimidoil = etanoimidoil* = 1-iminoetyl	CH_3C(=NH)-	P-65.1.7.2.2
acetoimidoiloamino = etanoimidoamido* = acetoimidoamido	CH_3-C(=NH)-NH-	P-66.4.1.3.5
acetoksy = acetyloksy*	CH_3-CO-O-	P-65.6.3.2.3
acetoksysulfonyl = (acetyloksy)sulfonyl*	CH_3-CO-O-SO_2-	P_65.3.2.3
acetonyl = 2-oksopropyl*	$^{3}CH_3$-^{2}CO-$^{1}CH_2$-	P-64.5.1

acetonyliden: patrz 2-oksopropyliden*		
acetonylidyn: patrz 2-oksopropylidyn*		
acetyl* = etanoil = 1-oksoetyl	CH_3-CO-	P-65.1.7.2.1
N-acetyloacetamido* = diacetyloamino (nie diacetyloazanyl; nie diacetamido)	$(CH_3\text{-}CO)_2N$-	P-66.1.2.1
acetyloamino = acetamido*	CH_3-CO-NH-	P-66.1.1.4.3
acetyloazanodiyl* (nie acetyloimino)	CH_3-CO-N<	P-66.1.14.4
2-acetylohydrazyn-1-yl = acetohydrazydo*	CH_3-CO-NH-NH-	P-66.3.2.3
acetyloksy* = acetoksy	CH_3-CO-O-	P-65.6.3.2.3
(acetyloksy)sulfony* = acetoksysulfonyl	CH_3-CO-O-SO_2-	P-65.3.2.3
adamantan-2-yl* = 2-adamantyl = tricyclo[3.3.1.1^{3,7}]dekan-2-yl (także isomer-1) 2-adamantyl = adamantan-2-yl* = tricyklo[3.3.1.1^{3,7}]dekan-2-yl		P-29.6.
adypoil = heksanodioil* = 1,6-dioksoheksano-1,6-diyl	-CO-$[CH_2]_4$-CO-	P-65.1.7.3.1
akrylohydrazonoil = prop-2-enohydrazonoil* = 1-hydrazynylidenoprop-2-en-1-yl	CH_2=CH-C(=NNH_2)-	P-65.1.7.3.2
akryloil = prop-2-enoil* = 1-oksoprop-2-en-1-yl	CH_2=CH-CO-	P-65.1.7.3.1
allil = prop-2-en-1-yl*	CH_2=CH-CH_2-	P-32.3
allilideno = prop-2-en-1-ylideno*	CH_2=CH-CH=	P-32.3

allilidyno = prop-2-en-1-ylidyne*	CH_2=CH-C≡	P-32.3
alumanyl*	H_2Al-	P-29.3.1; P-68.1.2
alumanylideno*	HAl=	P-29.3.1; P-68.1.2
amidochlorofosforyl = fosforamidochlorydoil* [nie chlorydo(amido)fosforyl]	(H_2N)ClP(O)-	P-67.1.4.1.1.4
amidyl = azanidyl*	$^{-}$NH-	P-72.6.3
amidyliden = azanidyliden*	$^{-}$N=	P-72.6.3
amino* = azanyl	H_2N-	P-62.2.3
[(4'-amino[1,1'-bifenyl]-4-yl)amino* = benzydyno		P-62.2.4.1.1
aminokarbonoimidoil* = karbamoimidoil = amino(imino)metyl	H_2N-C(=NH)-	P-65.2.1.5; P-66.4.1.3.1
aminokarbonotionyl = karbamotioil* = amino(sulfanylideno)metyl (nie tiokarbamoil)	H_2N-CS-	P-65.2.1.5; P-66.1.4.4
aminokarbonyl = karbamoil*	H_2N-CO-	P-65.2.1.5; P-66.1.1.4.1.1
(aminokarbonylo)amino = karbamoiloamino* (nie ureido)	H_2N-CO-NH-	P-66.1.6.1.1.3
[(aminokarbonylo)amino]karbonyl = karbamoilokarbamoil*	H_2N-CO-NH-CO-	P-66.1.6.1.1.4
2-(aminokarbonylo)hydrazyn-1-yl = 2-karbamoilohydrazyn-1-yl* = semikarbazydo	H_2N-CO-NH-NH-	P-68.3.1.2.4

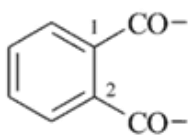
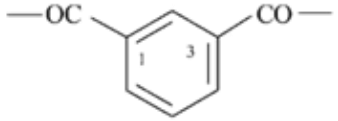
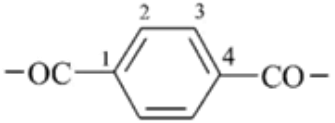
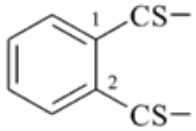
amidochlorosilil*	$(H_2N)Cl_2Si$-	P-67.1.4.2
[amino(hydroksyl)metylideno]amino* (nie 3-izoureido)	H_2N-C(OH)=N-	P-66.1.6.1.2.2
amino(imino)metyl = karbamoimidoil* = aminokarbonoimidoil	H_2N-C(=NH)-	P-65.2.1.5; P-66.4.1.3.1
[amino(imino)metyl]amino = karbamoimidoiloamino* = karbamoimidoamido (nie guanidino)	H_2N-C(=NH)-NH-	P-66.4.1.2.1.3
aminoksy: patrz aminooksy*		
aminooksalil = oksamoil* = amino(okso)acetyl	H_2N-CO-CO-	P-66.1.1.4.1.2
amino(okso)acetamido = oksamoiloamino*	H_2N-CO-CO-NH-	P-66.1.1.4.5.1
amino(okso)acetyl = oksamoil* = aminooksalil	H_2N-CO-CO-	P-66.1.1.4.1.2
[amino(okso)acetyl]imino = oksamoiloimino*	H_2N-CO-CO-N=	P-66.1.1.4.5.1
aminooksy* (nie aminoksy)	H_2N-O-	P-68.3.1.1.1.5
(aminometylideno)amino*	H_2N-CH=N-	P-66.4.1.3.3
(aminometylideno)hydrazynyl*	H_2N-CH=N-NH-	P-66.4.2.3.4
amino(sulfanylideno)metyl = karbamotioil* = aminokarbonotioil (nie tiokarbamoil)	H_2N-CS-	P-65.2.1.5; P-66.1.4.4
[amino(sulfanylideno)metylo]amino = karbamotioiloamino*	H_2N-CS-NH-	P-66.1.6.1.3.3
[(aminosulfanylo)metylideno]amino*	H_2N-S-CH=N-	P-66.1.6.1.3.3
S-aminosulfinoimidoil*	H_2N-S(=NH)-	P-66.4.1.3.4

aminosulfinyl* (nie sulfinamoil)	H_2N-SO-	P-66.1.1.4.2
(aminosulfinyl)oksy* (nie sulfinoamoiloksy)	H_3N-SO-O-	P-67.1.4.4.2
S-aminosulfonoimidoil*	H_2N-S(O)(=NH)-	P-66.4.1.3.4
S-aminosulfonodiimidoil*	H_2N-S(=NH)$_2$-	P-66.4.1.3.4
aminosulfonyl = sulfamoil*	H_2N-SO_2-	P-65.3.2.3; P-66.1.1.4.2
amonio = azaniumyl* = amoniumyl	H_3N^+-	P-73.6
amoniumyl = azaniumyl* = amonio	H_3N^+	P-73.6
anilino* = fenyloamino	C_6H_5-NH-	P-62.2.1.1.1
anilinosulfonyl = fenylosulfamoil* = (fenyloamino)sulfonyl	C_6H_5-NH-SO_2-	P-66.1.1.4.2
o-anizydyno: patrz 2-metoksyanilino* (także izomery *m*=3 i *p*=4)		
2-anizydyno: patrz 2-metoksyanilino*		
antracen-1-yl* = 1-antryl (także izomery 2-,9-)		P-29.6.2.3
antymonyl: patrz styboryl*		
arsanodiyl* (nie arsynodiyl)	HAs<	P-68.3.2.3.2.2
arsanotriyl* (nie arsynotriyl)	-As<	P-68.3.2.3.2.2
arsaniumyl* = arsonio = arsoniumyl	H_3As^+-	P-73.6

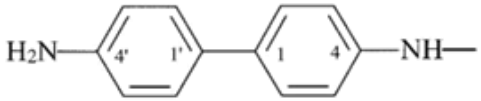
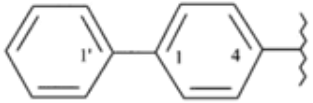
arsanyl* = arsyno	H_2As-	P-29.3.1; P-68.3.2.3.2.2
λ^5-arsanyl* = arsoranyl	H_4As-	P-68.3.2.3.2.2
arsanylidene*	HAs=	P-29.3.1; P-68.3.2.3.2.2
arsenozo: patrz oksoarsanyl		
arsenyl: patrz arsoryl*		
arso: patrz diokso-λ^5-arsanyl		
arsonato*	$(^-O)_2As(O)$-	P-72.6.1
arsonio = arsaniumyl* = arsoniumyl	H_3As^+-	P-73.6
arsoniumyl = arsaniumyl* = arsonio	H_3As^+-	P-73.6
arsono* = dihydroksynitroryl	$(HO)_2As(O)$-	P-67.1.4.1.1.1
arsonoil* = hydroarsoryl	HAsO<	P-67.1.4.1.1.2
arsoranyl = λ^5-arsanyl*	H_4As-	P-68.3.2.3.2.2
arsoroimidoil* = imidoarsoryl	-As(=NH)<	P-67.1.4.1.1.4
arsoryl* (nie arsenyl)	-AsO<	P-67.1.4.1.1.2
arsynoil: patrz arsanodiyl*		
arsynotriyl: patrz arsanotriyl*		
arsyno = arsanyl*	H_2As-	P-29.3.1; P-68.3.2.3.2.2
arsynoil* = dihydroarsoryl (nie arsynyl)	$H_2As(O)$-	P-67.1.4.1.1.2
arsynyl: patrz arsynoil*		

azanyliden* = amidyliden	$^{-}N=$	P-72.6.3
azaniumyl* = amonio = amoniumyl	H_3N^{+}-	P-73.6
azanyl = amino*	H_2N-	P-62.2.3
azanyliden : patrz imino*		
azanylidyn* (nie nitrylo)	N≡	P-35.2.2
azanylyliden* (nie nitrylo)	-N=	P-35.2.2; P-62.3.1.2
azo = diazenodiyl*	-N=N-	P-68.3.1.3.2.2
azoniano*	$(^{-}O)_2N(O)$-	P-72.6.1
azono* = dihydroksynitroryl	$(HO)_2N(O)$-	P-67.1.4.1.1.1; P-.4.1.1.5
azonotioil* = tioazonoil	HN(S)<	P-67.1.4.1.1.4
azonoil* = hydronitroryl	HN(O)<	P-67.1.4.1.1.2
azoksy*	-N(O)=N- lub -N=N(O)-	P-68.3.1.3.3.1
azydo*	N_3-	P-61.7
azyno: patrz hydrazinediylidene*		
azynoil* = dihydroazoryl (not azynyl)	$H_2N(O)$-	P-67.1.4.1.1.2
azynyl: patrz azynoil*		

benzal: patrz benzylidene*		
benzamido* = benzoiloamino	C_6H_5-CO-NH-	P-66.1.1.4.3

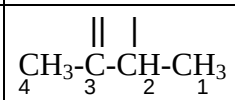
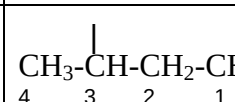
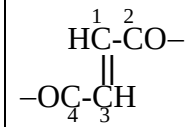
benzeno-1,4-dikarboksyimidoil* = tereftalimidoil = 1,4-fenylonebis(iminometylen) = 1,4-fenylenodikarbonoimidoil		P-65.1.7.3..2
benzenokarboksyimidohydrazydo* = 2-benzenokarboksyimidoilohydrazyn-1-yl	C_6H_5-C(=NH)-NH-NH-	P-66.4.2.3.6
benzenokarboksyimidoil* = benzoimidoil = imino(fenylo)metyl	C_6H_5-C(=NH)-	P-65.1.7.2.2
2-benzenokarboksyimidoilohydrazyn-1-yl = benzenekarboksyimidohydrazido	C_6H_5-C(=NH)-NH-NH-	P-66.4.2.3.6
benzeno-1,2-dikarbonyl* = ftaloil = 1,2-fenylenodikarbonyl = 1,2-fenylenobis(oksometylen)		P-65.1.7.4.2; P-65.1.7.3.1
benzeno-1,3-dikarbonyl* = izoftaloil = 1,3-fenylenodikarbonyl = 1,3-fenylenobis(oksometylen)		P-65.1.7.4.2; P-65.1.7.3.1
benzeno-1,4-dikarbonyl* = tereftaloil = 1,4-fenylenodikarbonyl = 1,4-fenylenobis(oksometylen)		P-65.1.7.3.1
benzeno-1,2-dikarbotioil* = 1,2-fenylenobis(sulfanylidenometylen) = fenylenobis(sulfanylidenometylen) (nie ditioftaloil)		P-65.1.7.3.1
benzeno-1,2-diyl: patrz 1,2-fenylen* (także izomery 1,3 i 1,4)		
benzenoselenonyl* = fenyloselenonyl	C_6H_5-SeO_2-	P-65.3.2.2.2

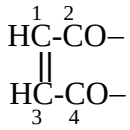
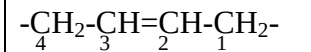
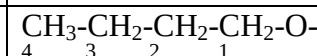
benzenosulfinoamido* = benzenosulfinyloamino = (fenylosulfinylo)amino	C_6H_5-SO-NH-	P-66.1.1.4.3
benzenosulfinohydrazonoamido* = benzenosulfinohydrazonoiloamino	C_6H_5-S(=N-NH_2)-NH-	P-66.4.2.3.5
benzenosulfinohydrazonoilamino = benzenosulfinohydrazonoamido*	C_6H_5-S(=N-NH_2)-NH-	P-66.4.2.3.5
benzenosulfinoselenoil* = fenylosulfinoselenoil	C_6H_5-S(Se)-	P-65.3.2.2.2
benzenosulfinyl* = fenylosulfinyl	C_6H_5-SO-	P-63.6; P-65.3.2.2.2
benzenosulfinyloamino = benzenosulfinoamido* = (fenylosulfinylo)amino	C_6H_5-SO-NH-	P-66.1.1.4.3
benzenosulfonoamido* = benzenesulfonyloamino = (fenylosulfonylo)amino	C_6H_5-SO_2-NH-	P-66.1.1.4.3
benzenosulfonyl* = fenylosulfonyl	C_6H_5-SO_2-	P-63.6; P-65.3.2.2.2
benzenosulfonyloamino = benzenesulfonoamido* = (fenylosulfonylo)amino	C_6H_5-SO_2-NH-	P-66.1.1.4.3
benzhydryl: patrz difenylometyl*		
benzohydroksymoil: patrz *N*-hydroksybenzenokarboksyimidoil*		
benzohydrazydo* = 2-benzoilohydrazyn-1-yl	C_6H_5-CO-NH-NH-	P-66.3.2.3
benzoil* = benzenokarbonyl = okso(fenylo)metyl	C_6H_5-CO-	P-65.1.7.2.1

benzoiloamino = benzamido*	C_6H_5-CO-NH-	P-66.1.1.4.3
benzoiloazanodiyl*	C_6H_5-CO-N<	P-66.1.1.4.4
benzoiloazanylidene = benzoiloimino*	C_6H_5-CO-N=	P-66.1.1.4.4
benzoiloimino* = benzoiloazanylideno	C_6H_5-CO-N=	P-66.1.1.4.4
benzoiloksy* = (fenylokarbonyl)oksy	C_6H_5-CO-O-	P-65.6.3.2.3
2-benzoilohydrazyn-1-yl = benzohydrazydo*	C_6H_5-CO-NH-NH-	P-66.3.2.3
benzoimidoil = benzenokarbokysimidoil* = imino(fenylo)metyl	C_6H_5-C(=NH)-	P-65.1.7.2.2
benzydyno = [(4'-amino[1,1'-bifenyl]-4-yl)amino]*		P-62.2.4.1.1
benzyl* = fenylometyl	C_6H_5-CH_2-	P-29.6.1; P-29.6.2.1
benzyliden* = fenylometyliden	C_6H_5-CH=	P-29.6.1; P-29.6.2.1
benzylidyn* = fenylometylidyn	C_6H_5-C≡	P-29.6.1; P-29.6.2.1
benzyloksy* = fenylometoksy	C_6H_5-CH_2-O-	P-63.2.2.1.1
[1,1'-bifenyl]-4-yl* (nie 4-fenylofenyl)		P-29.3.5
bis(acetyloksy)λ^3-jodanyl* (nie diacetoksyjodo)	(CH_3-CO-O)$_2$I-	P-68.5.1
bis(selanylo)boranyl = diselenoborono*	(HSe)$_2$B-	P-68.1.4.2
bis(sililoamino)silil* (nie trisilazan-3-yl)	SiH_3-NH-$\underset{\downarrow}{Si}H_2$-NH-$SiH_3$	P-29.3.2.2

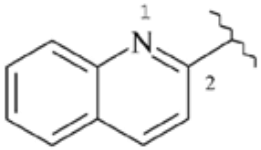
1,4-bis(sulfanylideno)butano-1,4-diyl: patrz butanobis(tioil)		
1,2-bis(sulfanylideno)etano-1,2-diyl = ditiooksalil =etanobis(tioil)*	-CS-CS-	P-65.1.7.2.3
bis(sulfanylo)fosforyl*	$(HS)_2P(O)$-	P-67.1.4.1.1.5
bizmutaniumyl* = bizmutonio = bizmutoniumyl	H_3Bi^+-	P-73-6
bizmutanyl* = bizmutyno	H_2Bi-	P-29.3.1; P-68.3.3
λ^5-bizmutaniliden = bizmutoranyliden	H_3Bi=	P-68.3.3
bizmutyno = bizmutanyl*	H_2Bi-	P-29.3.1; P-68.3.3
bizmutonio = bizmutaniumyl* = bizmutoniumyl	H_3Bi^+-	P-73.6
bizmutoranilidene = λ-bizmutanilidene*	H_3Bi=	P-68.3.3
boranodiyl* (nie borylene; nie boranylidene)	HB<	P-68.1.2
boranotriyl*	-B<	P-68.1.2
boranuidyl*	H_3B^--	P-72.6.3
(boranylamino)boranyl* (nie diborazan-1-yl)	H_2B-NH-BH-	P-68.1.2
boranyliden* (nie boryliden)	HB=	P-29.3.1; P-67.1.4.2; P-68.1.2
boranylidyn* (nie borylidyn)	B≡	P-29.3.1; P-67.1.4.2; P-68.1.2
borodiamidoil: patrz diaminoboranyl*		

borono* = dihydroksyboranyl	$(HO)_2B$-	P-67.1.4.2; P-68.1.4.2
boryl: patrz boranyl*		
borylen: patrz boranodiyl*		
boryliden: patrz boranyliden*		
borylidyne: patrz boranylidyn*		
bromo*	Br-	P-61.3.1
bromokarbonotioil = karbonobromidotioil*	BrCS-	P-65.2.1.5
bromozyl*	BrO-	P-61.3.2.3
bromyl*	BrO_2-	P-61.3.2.3
butanoamido* = butanoiloamino = butyroamido = butyryloamino	CH_3-$[CH_2]_2$-CO-NH-	P-66.1.1.4.3
butanobis(tionyl)* (nie ditiosukcynyl)	-CS-CH_2-CH_2-CS-	P-65.1.7.4.1; P-65.1.7.4.3
butanodiimidoil* = sukcynoimidoil = 1,4-diiminobutano-1,4-diyl	-C(=NH)-CH_2-CH_2-C(=NH)-	P-65.1.7.3.2
butanodioil* = sukcynyl = 1,4-dioksobutano-1,4-diyl	-CO-CH_2-CH_2-CO-	P-65.1.7.3
butano-1,1-diyl*	CH_3CH_2-CH_2-CH<	P-29.3.2.2
butano-1,4-diyl* (nie tetrametylen)	-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-	P-29.3.2.2
butanotioil* = tiobutyryl = 1-sulfanylidenobutyl	CH_3-CH_2-CH_2-CS-	P-65.1.7.4.1

butanoimidoil* = butyroimidoil = 1-iminobutyl	CH_3-CH_2-CH_2-C(=NH)-	P-65.1.7.4.1
butanoil* = butyryl = 1-oksobutyl	CH_3-CH_2-CH_2-CO-	P-65.1.7.3.1
butanoiloamino = butanoamido* = butyroamido = butyryloamino	CH_3-CH_2-CH_2-CO-NH-	P-66.1.1.4.3
butan-1-yl = butyl*	CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-	P-29.3.2.2; P-29.3.2.1
butan-2-yl* = 1-metylopropyl (nie *sec*-butyl)	CH_3-CH_2-CH(CH_3)-	P-29.3.2.2; P-29.4.1; P-29.6.3
butan-1-ylidene = butylidene*	CH_3-CH_2-CH_2-CH=	P-29.3.2.2; P-29.3.2.1
butan-2-ylidene* = 1-metylopropylidene (nie *sec*-butylidene)	CH_3-CH_2-C(CH_3)=	P-29.3.2.2; P-29.4.1; P=29.6.3
butan-1-ylidyne = butylidyne*	CH_3-CH_2-CH_2-C≡	P-29.3.2.2; P-29.3.2.1
butan-2-yloksy* = 1-metylopropoksy (nie *sec*-butoksy)	CH_3-CH_2-CH(CH_3)-O-	P-63.2.2.2
butan-2-yl-3-ylidene*		P-29.3.2.2
butan-3-yl-1-ylidene*		P-29.3.2.2
(2*E*)-but-2-enodioil* = fumaroil = (2*E*)-1,4-dioksobut-2-eno-1,4-diyl		P-65.1.7.3.1

(2*Z*)-but-2-enedioil* = maleoil = (2*Z*)-1,4-dioksobut-2-eno-1,4-diyl		P-65.1.7.3.1
but-2-eno-1,4-diyl*		P-32.1.1
but-2-enoil*	CH_3-CH=CH-CO-	P-65.1.7.4
but-1-enyl: patrz but-1-en-1-yl*		
but-1-en-1-yl* (nie but-1-enyl)	CH_3CH_2-CH=CH-	P-32.1.1
but-2-enyl: patrz but-2-en-1-yl*		
but-2-en-1-yl* (nie but-2-enyl)	CH_3-CH=CH-CH_2-	P-32.1.1
but-3-en-2-yl* = 1-metylprop-2-en-1-yl		P-32.1.1
butoksy* (nie butyloksy)		P-63.2.2.2
sec-butoksy: patrz butan-2-yloksy* (nie *sec*-butyloksy)		
tert-butoksy (niepodstawiony*) = 2-metyolopropan-2-yloksy* = 1,1-dimetyloetoksy (nie *tert*-butyloksy)	CH_3-C(CH_3)$_2$-O-	P-63.2.2.2
butyl* = butan-1-yl	CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-	P-29.3.2.1; P-29.3.2.2
sec-butyl: patrz butan-2-yl*		
tert-butyl (niepodstawiony*) = 2-metylopropan-2-yl* = 1,1-dimetyloetyl	CH_3-C(CH_3)$_2$-	P-29.6.1; P-29.4.1

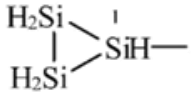
butyliden* = butan-1-yliden	CH_3-CH_2-CH_2-CH=	P-29.3.2.1; P-29.3.2.2
sec-butyliden: patrz butan-2-yliden*		
butylidyne* butan-1-ylidyne	CH_3-CH_2-CH_2-C≡	P-29.3.2.1; P-29.3.2.2
butyloksy: patrz butoksy		
sec-butyloksy: patrz butan-2-yloksy* (nie *sec*-butoksy)		
tert-butyloksy: patrz *tert*-butoksy (niepodstawiony*) patrz 2-metylpropan-2-yloksy*		
butyroamido = butanoamido* = butyryloamino = butanoilamino	CH_3-$(CH_2)_2$-CO-NH-	P-66.1.1.4.3
butyroimidoil = butanoimidoil* = 1-iminobutyl	CH_3-CH_2-CH_2-C(=NH)-	P-65.1.7.4.1
butyryl = butanoil* = 1-oksobutyl	CH_3-CH_2-CH_2-CO-	P-65.1.7.3.1
butyryloamino = butanoamido* = butanoiloamino = butyroamido	CH_3-CH_2-CH_2-CO-NH-	P-66.1.1.4.3

chinolin-2-yl* = 2-chinolil (także izomery 3-, 4-, 5- ,6-, 7- i 8)		P-29.6.2.3
2-chinolil = chinolin-2-yl*		P-29.6.2.3
chloro*	Cl-	

chloro(amido)fosforyl = fosforoamidochlorydoil*	$(H_2N)ClP(O)^-$	P-67.1.4.1.1..4.
chloroarsanyl*	$ClAsH^-$	P-67.1.4.1.1.6
chloroboranyl* (nie chloroboryl)	$ClBH^-$	P-68.1.4.2
chloroboryl: patrz chloroboranyl*		
chloroformyl: patrz karbonochloridoil*		
C-chlorokarbonoimidoil = karbonochlorimidoil*	ClC(=NH)-	P-65.2.1.5
chlorokarbonyl = karbonochloridoil*	ClCO-	P-65.2.1.5
chlorooksalil = chloro(okso)acetyl*	ClCO-CO-	P-65.1.7.2.4
chloro(okso)acetyl* = chlorooksalil	ClCO-CO-	P-65.1.7.2.4
chloroksy: patrz chloryl*		
chlorosulfinyl*	ClSO-	P-65.3.2.3; P-67.1.4.4.1
chlorosulfonyl*	$ClSO_2$-	P-65.3,2,3; P-67.1.4.4.1
(chlorosulfonyl)oksy* = sulfurochloridoiloksy	$ClSO_2$-O-	P-67.1.4.4.2
chlorozo: patrz chlorozyl*		
chlorozyl* (nie chlorozo)	OCl-	P-61.3.2.3
chloryl* (nie chloroksy)	O_2Cl-	P-61.3.2.3
cynamoil = 3-fenyloprop-2-enoyl*	C_6H_5-CH=CH-CO-	P-65.1.7.3.1
cyjaniano* = karbononitrydoiloksy	NC-O-	P-65.2.2

cyjano* = karbononitrydoil	NC-	P-66.5.1.1.4
cyjanokarbonyl = karbocyjanianoil*	NC-CO-	P-65.2.1.5
cyjanodisulfanyl* = karbononitrydoilo(disulfanyl) (nie tiocyjanianosulfanyl)	NC-SS-	P-65.2.2
cyjano(izocyjaniano)(fosforotioil) = fosforocyjanidoizocyjanianoil* = cyjano(izocyjaniano)(tiofosforyl)	(OCN)(CN)P(S)-	P-67.1.4.1.1.4
cyjano(izocyjaniano)(tiofosforyl) = fosforocyjanidoizocyjanianidotioil*= = cyjano(izocyjaniano)(fosforotioil)	(OCN)(CN)P(S)-	P-67.1.4.1.1.4
cyjanoperoksy* = karbononitrydoperoksy	NC-OO-	P-67.1.4.4.1
cyjanosulfonyl* = sulfurocyjanidoil	NC-SO_2-	P-67.1.4.4.1
cykloheksanokarbonyl* = cykloheksylokarbonyl = cykloheksylo(okso)metyl	C_6H_{11}-CO-	P-65.1.7.4.2
cykloheksanokarboksyimidoil* (nie *C*-cykloheksylokarbonoimidoil)	C_6H_{11}-C(=NH)-	P-65.1.7.4.2
cykloheksano-1,1-diyl* (nie cykloheksanylidene)	C_6H_{10}<	P-29.3.3
cykloheksano-1,4-diyl* (także izomery 1,1-, 1,2-in1,3-) (nie 1,4-cykloheksylen)	-C_6H_{10}-	P-29.3.3

cykloheksanyl = cykloheksyl*	C_6H_{11}-	P-29.3.3
cykloheksanyliden = cykloheksyliden*	C_6H_{10}=	P-29.3.3
cykloheksyl* = cykloheksanyl	C_6H_{11}-	P-29.2; P-29.3.3
C-cykloheksylokarbonoimidoil: patrz cykloheksanokarboksyimidoil*		
cykloheksylokarbonyl: patrz cykloheksanokarbonyl*		
1,4-cykloheksylen: patrz cykloheksano-1,4-diyl* (także izomery 1,1-, 1,2- i 1,3)		
cykloheksyliden* = cykloheksanyliden		
cyklopentanokarboksyimidoil* cyklopentylo(imino)metyl = *C*-cyklopentylokarbonoimidoil	C_5H_9-C(=NH)-	P-65.1.7.2.4
cyklopentylo(hydrazynylideno)metyl: patrz cyklopentanokarbohydrazonoil*		
cyklopentylo(imino)metyl: patrz cyklopentanokarboksyimidoil*		
C-cyklopentylokarbonoimidoil: patrz cyklopentanokarboksyimidoil*		
cyklopropanyl = cyklopropyl*		
cyklopropanyliden = cyklopropyliden*	C_3H_4=	P-29.3.3

cyklopropyl* = cyklopropanyl	C_3H_5-	P-29.3.3
cyklopropyliden* = cyklopropanyliden		
cyklotrisilanyl = trisiliranyl*		P-68.2.2

decyl* = dekan-1-yl	CH_3-$[CH_2]_8$-CH_2-	P-29.3.2.1; P-29.3.2.2
decyliden* = dekan-1-yliden	CH_3-$[CH_2]_8$-CH=	P-29.3.2.1; P-29.3.2.2
decylidyn* = dekanylidyn	CH_3-$[CH_2]_8$-C≡	P-29.3.2.1; P-29.3.2.2
dekanodioil* = 1,10-dioksodekanyl	-CO-$[CH_2]_8$-CO-	P-65.1.7.4.1
dekanoil* = 1-oksodecyl	CH_3-$[CH_2]_8$-CO-	P-65.1.7.4.1
dekan-1-yl: patrz decyl*	CH_3-$[CH_2]_8$-CH_2-	P-29.3.2.2; P-29.3.2.1
dekan-1-yliden = decyliden*	CH_3-$[CH_2]_8$-CH=	P-29.3.2.2; P-29.3.2.1
dekanylidyn = decylidyn*	CH_3-$[CH_2]_8$-C≡	P-29.3.2.2; P-3.2.1
diacetamido: patrz *N*-acetyloacetamido*		
diacetoksyjodo: patrz bis(acetyloksy)-λ^3-jodanyl*		
diacetylamino = *N*-acetylacetamido*	$(CH_3$-$CO)_2$N-	P-66.1.2.1
diacetyloazanyl: patrz *N*-acetyloacetamido*		
diaminoboranyl* (nie borodiaminodoil)	$(H_2N)_2$B-	P-67.1.4.2

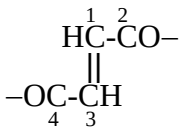
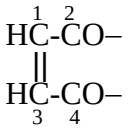
diaminofosfanyl*	$(NH_2)_2P$-	P-67.1.4.1.1.6
(diaminometylideno)amino*	$(H_2N)_2C=N$-	P-66.4.1.2.1.3
diarsanyl*	H_2As-AsH-	P-29.3.2.2
diazano-1,2-diyl = hydrazyno-1,2-diyl* (nie hydrazo)	-HN-NH-	P-29.3.2.2; P-68.3.1.2.1
diazanodiyliden = hydrazynodiyliden* (nie azyno)	=N-N=	P-29.3.2.2; P-68.3.1.2.1
diazanyl = hydrazynyl* (nie hydrazyno)	H_2N-NH-	P-29.3.2.2: P-68.3.1.2.1
diazanyliden = hydrazynyliden* (nie hydrazono)	H_2N-N=	P-29.3.2.2; P-68.3.1.2.1
diazanylidenometyliden = hydrazynylidenometyliden*	H_2N-N=C=	P-65.2.1.8
diazanokarbohydrazydo* = 2-diazanokarbonylohydrazyn-1-yl (nie karbazono)	HN=N-CO-NH-NH-	P-68.3.1.3.4
diazenokarbonylodiazenyl*	HN=N-CO-N=NH-	P-68.3.1.3.6
2-diazenokarbonylohydrazyn-1-yl = diazenokarbohydrazydo* (nie karbazono)	HN=N-CO-NH-NH-	P-68.3.1.3.4
diazenodiyl* = azo	-N=N-	P-68.3.1.3.2.1; P-68.3.1.3.2.2
diazenyl*	H_2N=N-	P-32.1.1; P-68.3.1.3.2.2

diazenylo(hydrazynylideno)metyl = formazan-3-yl*	$^{1}HN=^{2}N-^{3}C(=^{4}N-^{5}NH_2)-$	P-68.3.1.3.5.2
(diazenylometylideno)hydrazynyl = formazan-5-yl*	$^{1}HN=^{2}N-^{3}CH=^{4}N-^{5}NH-$	P-68.3.1.3.5.2
diazo*	N_2-	P-61.4
diazoamino: patrz triaz-1-ene-1,3-diyl*		
diazonio = diazyn-1-ium-1-yl*	$N\equiv N^+$-	P-73.6
diazyn-1-ium-1-yl* = diazonio	$N\equiv N^+$-	P-73.6
dibizmutano-1,2-diyl*	-BiH-BiH-	P-68.3.3
diborazan-1-yl: patrz (boranylamino)boranyl*		
diboroksanyl*	H_2B-O-BH-	P-68.1.2
dichloroboranyl* (nie dichloroboryl)	Cl_2B-	P-67.1.4.2
dichloroboryl: patrz dichloroboranyl*		
dichlorofosfanyl* = dichlorofosfino	Cl_2P-	P-67.1.4.1.1.6; P-68.3.2.3.2.2
dichlorofosfino = dichlorofosfanyl*	Cl_2P-	P-67.1.4.1.1.6
dichlorofosforyl = fosforodichlorydoil*	$Cl_2P(O)$-	P-67.1.4.1.1.4
dichloro-λ^3-jodanyl* (nie dichlorojodo)	Cl_2I-	P-68.5.1
dichlorojodo: patrz dichloro-λ^3-jodanyl*		
difenylometyl* (nie benzhydryl)	$(C_6H_5)_2CH$-	P-29.6.3

difosfanyl* (nie difosfino)	H_2P-PH-	P-29.3.2.2; P-68.3.2.3.2.2
difosfino: patrz difosfanyl*		
dihydrofosfonoimidoil = fosfinoimidoil*	$H_2P(=N)$-	P-67.1.4.1.2
dihydrofosforotioil = fosfinotioil*	$H_2P(S)$-	P-67.1.4.1.2
dihydrofosforyl = fosfinoil*	$H_2P(O)$-	P-67.1.4.1.2
dihydrostyboroimidoil = stybinoimidoil*	$H_2Sb(=NH)$-	P-67.1.4.1.2
dihydrostyborotioil = stybinotioil*	$H_2Sb(S)$-	P-67.1.4.1.2
dihydrostyboryl = stybinoil*	$H_2Sb(O)$-	P-67.1.4.1.2
dihydroksyboranyl = borono*	$(HO)_2B$-	P-67.1.4.2; P-68.1.4.2
dihydroksykarbonoimidoil*	HO-C(=N-OH)-	P-65.1.3.3.2
dihydroksy- λ^3-jodanyl* (nie dihydroksyjodo)	$(HO)_2I$-	P-68.5.1
dihydroksyjodo: patrz dihydroksy-λ^3-jodanyl*		
dihydroksynitroryl = azono*	$(HO)_2N(O)$-	P-67.1.4.1.1.1
dihydroksyfosfanyl* = dihydroksyfosfino	$(HO)_2P(O)$-	P-67.1.4.1.1.6
dihydroksyfosfino = dihydroksyfosfanyl*	$(HO)_2P(O)$-	P-67.1.4.1.1.6
dihydroksyfosfinotioil: patrz dihydroksyfosforotioil*		
dihydroksyfosforotioil* (nie dihydroksyfosfinotioil)	$(HO)_2P(S)$-	P-67.1.4.1.1.5
dihydroksy(sulfanylo)silil*	$(HS)(HO)_2Si$-	P-67.1.4.2

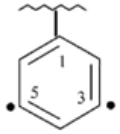
1,4-diiminobutano-1,4-diyl = butanodiimidoil* = sukcynoimidoil	-C(=NH)-CH_2-CH_2-C(=NH)-	P-65.1.7.3.2
1,2-diiminoetano-1,2-diyl = etanodiimidiyl* = oksaloimidoil	-C(=NH)-C(=NH)-	P-651.7.2
1,3-diiminopropano-1,3-diyl = propanodiimidoil* = malonoimidoil	-C(=NH)-CH_2-C(=NH)-	P-65.1.7.4.1
dimetoksyfosfanyl*	$(CH_3$-O$)_2$P-	P-67.1.4.1.1.6
dimetoksyfosforoselenoil* = dimetoksy(selenofosforyl)	$(CH_3$-O$)_2$P(Se)-	P-67.1.4.1.1.5
dimetoksyfosforyl*	$(CH_3$-O$)_2$P(O)-	P-67.1.4.1.1..5
(dimetoksyfosforylo)sulfanyl*	$(CH_3$-O$)_2$P(O)-S-	P-67.1.4.1.3
dimetoksy(selenofosforyl) = dimetoksyfosforoselenoil*	$(CH_3$-O$)_2$P(Se)-	P-67.1.4.1..1.5
(dimetyloamido)fosforyl = *N*,*N*-dimetylofosforoamidoil*	$(CH_3)_2$N-P(O)<	P-67.1.4.1.1.4
dimetylamoniumyliden: patrz dimetylazaniumyliden*		
2,3-dimetyloanilino* = (2,3-dimetylofenylo)amino (także izomery 2,4-, 2,5-, 2,6-, 3,4- i 3,5-) (nie ksylidyno)	2,3-$(CH_3)_2C_6H_3$-NH-	P-62.2.1.1.2

dimetyloazoniumyliden* (nie dimetyloamoniumyliden)	$(CH_3)_2N^+=$	P-73.6
dimetyloazynoil* (nie dimetylonitroryl)	$(CH_3)_2N(O)$-	P-67.1.6
(dimetyloboranyl)oksy*	$(CH_3)_2B$-O-	P-68.1.4.2
1,1-dimetyloetoksy = (2-metylopropan-2-yl)oksy* = *tert*-butoksy (niepodstawiony*)	$(CH_3)_3C$-O-	P-63.2.2.2
1,1-dimetyloetyl = *tert*-butyl (niepodstawiony*) = 2-metylopropan-2-yl	$(CH_3)_3C$-	P-29.4.1; P-29.6.1
dimetyloiminio: patrz dimetyloazaniumylidene*		
dimetylonitroryl: patrz dimetyloazynoil*		
(2,3-dimetylofenylo)amino = 2,3-dimetyloanilino* (także izomery 2,4-, 2,5-, 2,6-, 3,4- i 3,5-) (nie ksylidyno)	2,3-$(CH_3)_2C_6H_5$-NH-	P-62.2.1.1.2
dimetylofosfinoselenoil* = dimetylo(selenofosfinoil)	$(CH_3)_2P(Se)$-	P-67.1.4.1.1.4
N,N-dimetylofosforoamidoil* = (dimetylamido)fosforyl	$(CH_3)_2N$-P(O)<	P-67.1.4.1.1.4
1,1-dimetylopropyl = 2-metylbutan-2-yl* (nie *tert*-pentyl)	CH_3-CH_2-$C(CH_3)_2$-	P-29.4.1; P-29.6.3
2,2-dimetylopropyl* (nie neopentyl)	CH_3-$C(CH_3)_2$-CH_2-	P-57.1.4

dimetylo(selenofosfinoil) = dimetylfosfinoselenoil*	$(CH_3)_2P(Se)$-	P-67.1.4.1.1.4
diokso-λ^5-arsanyl* (nie arso)	O_2As-	P-61.6
1,4-dioksobutano-1,4-diyl = butanodioil* = sukcynyl	-CO-CH_2-CH_2-CO-	P-65.1.7.3.1
(2*E*)-1,4-dioksobut-2-eno-1,4-diyl = (2*E*)-but-2-enedioil* = fumaroil		P-65.1.7.3.1
(2*Z*)-1,4-dioksobut-2-eno-1,4-diyl = (2*Z*)-but-2-enedioil* = maleoil		P-65.1.7.3.1
1,10-dioksodekano-1,10-diyl = dekanodioil*	-CO-$[CH_2]_8$-CO-	P-65.1.7.4.1
1,2-dioksoetano-1,2-diyl = oksalil* = etanodioil	-CO-CO-	P-67.1.7.2.1
1,6-dioksoheksano-1,6-diyl = heksanodioil* = adypoil	-CO-$[CH_2]_4$-CO-	P-65.1.7.3.1
1,5-dioksopentano-1,5-diyl = pentanodioil* = glutaryl	-CO-CH_2-CH_2-CH_2-CO-	P-65.1.7.3.1
diokso-λ^5-fosfanyl* (nie fosfo)	O_2P-	P-61.6; P-67.1.4.1.1.6
1,3-dioksopropano-1,3-diyl = propanodioil* = malonyl	-CO-CH_2-CO-	P-65.1.7.3.1

1,2-dioksopropyl = 2-oksopropanoil* (nie piruwoil)	CH_3-CO-CO-	P-65.1.1.2.3; P-65.1.7.4.1
dioksy: patrz peroksy*		
diselanodiyl* = diseleno	-SeSe-	P-63.3.1
diselanyl* = diselenohydroperoksy	HSe-Se-	P-63.4.2.2
diseleno = diselanedil*	-SeSe-	P-63.3.1
diselenoborono* = bis(selanyl)boranyl	$(HSe)_2B$-	P-68.1.4.2
diselenohydroperoksy = diselanyl*	HSe-Se-	P-63.4.2.2
disilano-1,1-diyl*	$H_3Si=SiH<$	P-29.3.2.2; P-68.2.2
disilanyl*	$H_3Si-SiH_3$-	P-29.3.2.2; P-68.2.2
disilazan-1-yl: patrz (sililoamino)silil*		
disilazan-2-yl: patrz disililoamino*		
disiloksan-1-yl*	$H_3Si-O-SiH_2$-	P-29.3.2.2; P-68.2.2
disililoamino* (nie disilazan-2-yl)	$(SiH_3)_2N$-	P-29.3.2.2; P-68.2.2
disulfanodiyl* = ditio	-S-S-	P-63.3.1
disulfanidyl*	$^{-}$S-S-	P-72.6.3
disulfanyl* = ditiohydroperoksy	HS-S-	P-63.4.2.2
(disulfanylokarbonyl)oksy = (disulfanokarbonyl)oksy* = (ditiohydroperoksykarbonyl)oksy	HS-S-CO-O-	P-65.2.1.7

ditellanodiyl* = ditelluro	-Te-Te-	P-63.3.1
ditellanyl* = ditellurohydroperoksy	HTe-Te-	P-63.4.2.2
ditelluro = ditellanodiyl*	-Te-Te-	P-63.3.1
ditellurohydroperoksy = ditellanyl*	HTe-Te-	P-63.4.2.2
ditio = disulfanodiyl	-S-S-	P-63.3.1
1,4-ditiobutano-1,4-diyl: patrz butanobis(tioil)*		
ditioftaloil: patrz benzeno-1,2-dikarbotioil*		
[(ditiohydroperoksy)karbonylo]oksy = (disulfanokarbonylo)oksy* = (disulfanylokarbonylo)oksy	HSS-CO-O-	P-65.2.1.7
ditiohydroperoksy = disulfanyl*	HSS-	P-63.4.2.2
ditiokarboperoksoil* (pozycja atomów siarki nieznana)	HOS_2C-	P-65.1.5.3
ditiokarboksy* = sulfanylokarbonotioil	HS-CS-	P-65.2.1.6
[(ditiokarboksy)sulfanylo]karbonotioil* = [sulfanylo(tiokarbonylo)sulfanylo]tiokarbonyl = [(sulfanylokarbonotioil)sulfanylo]karbonotioil (nie [(ditiokarboksy)sulfanylo]tioformyl	HS-CS-S-CS-	P-65.2.3.1.5
[(ditiokarboksy)sulfanylo]tioformyl: patrz [(ditiokarboksy)sulfanylo]karbonotioil*		

1,2-ditiooksalo = hydroksylo(sulfanylideno)etanotioil*	HO-CS-CS-	P-65.1.7.2.4
1,2-ditiooksalil = etanobis(tionyl)* = bis(sulfanylideno)etano-1,2-diyl	-CS-CS-	P-65.1.7.2.3
ditiosukcynyl: patrz butanobis(tionyl)*		
ditiosulfo* (niesprecyzowany)	HS_3O-	P-65.3.2.1
1,1-diyloetyl*	CH_3-$C^{2\bullet}$–	P-71.5
3,5-diylofenyl*		P-71.5
dodekanoil* = 1-oksododecyl	CH_3-$[CH_2]_{10}$-CO-	P-65.1.7.4.1
dodekan-1-yl = dodecyl*	CH_3-$[CH_2]_{10}$-CH_2-	P-29.3.2.2; P-29.3.2.1
dodecyl* = dodekan-1-yl	CH_3-$[CH_2]_{10}$-CH_2-	P-29.3.2.1; P-29.3.2.2

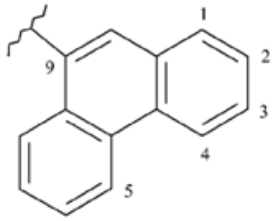
episeleno (tworzenie pierścienia)	-Se-	P-63.5
epitelluro (tworzenie pierścienia)	-Te-	P-63.5
epitio (tworzenie pierścienia)	-S-	P-63.5
epoksy (tworzenie pierścienia)	-O-	P-63.5
etanobis(tioil)* = ditiooksalil	-CS-CS-	P-65.1.7.2.3

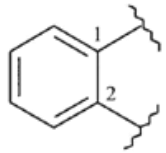
etanodiimidoil* = oksaloimidoil = 1,2-diiminoetano-1,2-diyl	-C(=NH)-C(=NH)-	P-65.1.7.2.2
etanodioil = oksalil* = 1,2-dioksoetano-1,2-diyl	-CO-CO-	P-65.1.7.2.1
etanodioilobis(azanodiyl) = oksalilobis(azanodiyl)*	-HN-CO-CO-NH-	P-66.1.1.4.5.2
etanodioilobis(azanotriyl) = oksalilodinitrylo* = oksalilobis(azanotriyl) = etanodioilodinitrylo	>N-CO-CO-N<	P-66.1.1.4.5.2
etanodioilobis(azanylyliden) = oksalilobis(azanylylidene)*	=N-CO-CO-N=	P-66.1.1.4.5.2
etanodioilodinitrylo = oksalilodinitrylo* = oksalilobis(azanotriyl) = etanodioilobis(azanotriyl)	>N-CO-CO-N<	P-66.1.1.4.5.2
etano-1,1-diyl*	CH_3-CH<	P-29.3.2.2
etano-1,2-diyl* = etylen	-CH_2-CH_2-	P-29.3.2.2; P-29.6.2.3
etano-1,2-diylobis(oksy)* = etylenobis(oksy) (nie etano-1,2-diylodioksy)	-CH_2-CH_2-O-	P-63.2.2.1.3
etano-1,2-diylodioksy: patrz etano-1,2-diylobis(oksy)*		
etanohydrazonoamido* = etanohydrazonoiloamino	CH_3-C(=N-NH_2)-NH-	P-66.4.2.3.5
etanohydrazonoil* = acetohydrazonoil = 1-hydrazynylidenoetyl	CH_3-C(=N-NH_2)-	P-65.1.7.2.2

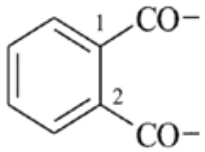
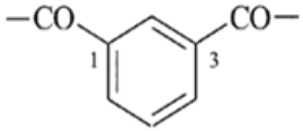
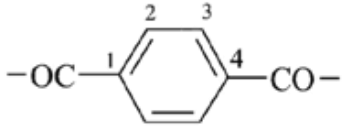
etanohydrazonoilamino = etanehydrazonamido*	CH_3-C(=N-NH_2)-NH-	P-66.4.2.3.5
etanoimidoamido* = acetoimidoamido = acetoimidoiloamino	CH_3-C(=NH)-NH-	P-66.4.1.3.5
etanoimidohydrazydo* = 2-etanoimidoilohydrazyn-1-yl	CH_3-C(=NH)-NH-NH-	P-66.4.2.3.6
etanoimidoil* = acetoimidoyl = 1-iminoetyl	CH_3-C(=NH)-	P-67.1.7.2.2
2-etanoimidoilohydrazyn-1-yl = etanoimidohydrazydo*	CH_3-C(=NH)-NH-NH-	P-66.4.2.3.6
etanoil = acetyl* = 1-oksoetyl	CH_3-CO-	P-65.1.7.2.1
etanosulfonodiimidoamido* = etanosulfonodiimidoiloamino	CH_3-CH_2-S(=NH)$_2$-NH-	P-66.4.1.3.5
etanosulfonodiimidoiloamino = etanosulfonodiimidamido*	CH_3-CH_2-S(=NH)$_2$-NH-	P-66.4.1.3.5
etanosulfonotioil* = etylosulfonotioil	CH_3-CH_2-S(O)(S)-	P-65.3.2.2.2
etanosulfonyl* = etylosulfonyl	CH_3-CH_2-SO_2-	P-63.6; P-65.3.2.2.2
etanotioamido* = etanotioilamino = tioacetamido	CH_3-CS-NH-	P-66.1.4.4
etanotioil* = tioacetyl = 1-sulfanylidenoetyl	CH_3-CS-	P-65.1.7.2.3
etanotioilamino = etanotioamido* = tioacetamido	CH_3-CS-NH-	P-66.1.4.4
etanyl = etyl*	CH_3-CH_2-	P-29.3.2.2; P-293.2.1

etanyliden = etyliden*	CH_3-CH=	P-29.3.2.2; P-29.3.2.1
etanylidyn = etylidyn*	CH_3-C≡	P-29.3.2.2; P-29.3.2.1
etan-1-yl-2-yliden*	-CH_2-CH=	P-29.3.2.2
eteno-1,2-diyl* (nie winylene)	-CH=CH-	P-32.1.1
etoksy* = etyloksy	CH_3-CH_2-O-	P-63.2.2.2
2-etoksyanilino* = (2-etoksyfenylo)amino (także izomery 3- i 4-) (nie *o*-fenetydyno)	2-(CH_3-CH_2-O)C_6H_4-NH-	P-65-2.1.1.2
etoksykarbonyl* (nie karboetoksy)	CH_3-CH_2-O-CO-	P-65.6.3.2.3
(2-etoksyfenylo)amino = 2-etoksyanilino* (także izomery 3- i 4-) (nie *o*-, *m*- lub *p*-fenetydyno)	2-(CH_3-CH_2-O)C_6H_4-NH-	P-65.2.1.1.2
etyl* = etanyl	CH_3-CH_2-	P-29.3.2.1; P-29.3.2.2
etylen = etano-1,2-diyl* (nie winylene)	-CH_2-CH_2-	P-29.6.2.3; P-29.3.2.2
etylenobis(oksy) = etano-1,2-diylobis(oksy)*	-O-CH_2-CH_2-O-	P-63.2.2.1.3
etylenodioksy: patrz etano-1,2-diylobis(oksy)*		
etyliden* = etanyliden	CH_3-CH=	P-29.3.2.1; P-29.3.2.2
etylidyn* = etanylidyn	CH_3-C≡	P-29.3.2.1; P-29.3.2.2
etyloksy: patrz etoksy*		
1-etylopropyliden = pentan-3-ylidene*	(CH_3-CH_2)$_2$C=	P-29.4.1; P-29.3.2.2
etylostybinoil*	CH_3-CH_2-HSb(O)-	P-67.1.4.1.1.3

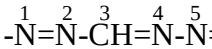
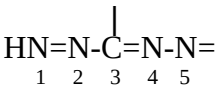
etylosulfanyl* = etylotio	CH_3-CH_2-S-	P-63.2.5.1
etylisulfinoimidoil = etanosulfinoimidoil*	CH_3-CH_2-S(=NH)-	P-65.3.2.2.2
etylosulfinyl = etanosulfinyl*	CH_3-CH_2-SO-	P-63.6; P-65.3.2.2.2
etylosulfonoimidoil = etanosulfonoimidoil*	CH_3-CH_2-S(O)(=NH)-	P-65.3.2.2.2
etylosulfonotioil = etanosulfonotioil*	CH_3-CH_2-S(O)(S)-	P-65.3.2.2.2
etylosulfonyl = etanosulfonyl*	CH_3-CH_2-SO_2-	P-63.6; P-65.3.2.2.2
etylotio = etylosulfanyl*		
etynyl* = winyl	CH_2=CH-	P-32.3
etynyliden* = winyliden	CH_2=C=	P-32.3

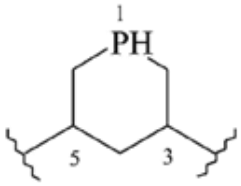
fenantren-9-yl* = 9-fenantryl (także izomery 1-, 2-, 3- I 4-)		P-29.3.4.1; P-29.29.6.2.3
9-fenantryl: patrz fenantren-9-yl* (także izomery 1-, 2-, 3- i 4-)		
o-fenetydyno: patrz 2-etoksyanilino* (także izomery *m* = 3 i *p* = 4)		P-63.2.2.2
fenoksy* = fenyloksy	C_6H_5-O-	
fenyl*	C_6H_5-	P-29.6.1

fenyloamino = anilino*	C_6H_5-NH-	P-62.2.1.1.1
(fenyloamino)sulfonyl = fenylosulfamoil* = anilinosulfonyl	C_6H_5-NH-SO_2-	P-66.1.1.4.2
fenyloazo = fenylodiazenyl*	C_6H_5-N=N-	P-68.3.1.3.2.2
fenylokarbonyl: patrz benzoil*		
(fenylokarbonylo)oksy = benzoiloksy*	C_6H_5-CO-O-	P-65.6.3.2.3
fenylo(chlorofosfonyl) = fenylofosfonochlorydoil*	C_6H_5-P(O)Cl-	P-67.1.4.1.1.4
fenylodiazenyl* = fenyloazo	C_6H_5-N=N-	P-68.3.1.3.2.2
1,2-fenylen* (nie benzeno-1,2-diyl) (także izomery 1,3- i 1,4-)		P-29.6.1
1,4-fenylenobis(iminometylen) = benzeno-1,4-dikarboksyimidoil* = tereftalimidoil		P-65.1.7.3.2
1,2-fenylenobis(oksometylen): patrz 1,2-benzenodikarbonyl*		
1,3-fenylenobis(oksometylen): patrz 1,3-benzenodikarbonyl*		
1,4-fenylenobis(oksometylen): patrz 1,4-benzenodikarbonyl*		

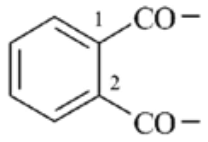
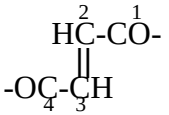
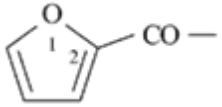
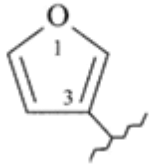
1,4-fenylenobis(tiooksometylen): patrz benzeno-1,2-dikarbotioil*		
1,2-fenylenodikarbonyl = benzeno-1,2-dikarbonyl* = ftaloil = 1,2-fenylenobis(oksometylen)		P-65.1.7.3.1; P-65.1.7.4.2
1,3-fenylenodikarbonyl = benzeno-1,3-dikarbonyl* = izoftaloil = 1,3-fenylenobis(oksometylen)		P-65.1.7.3.1; P-65.1.7.4.2
1,4-fenylenodikarbonyl = benzeno-1,4-dikarbonyl = tereftaloil = 1,4-fenylenobis(oksometylen)		P-65.1.7.3.1; P-65.1.7.4.2
2-fenyloetenyl* = 2-fenylowinyl = styryl	C_6H_5-CH=CH-	P-32.3
fenyloetyl* (nie fenetyl)	C_6H_5-CH_2-CH_2-	P-29.6.3
fenylometoksy: patrz benzyloksy*		
fenylometyl = benzyl*	C_6H_5-CH_2-	P-29.6.1; P-29.6.2.1
fenylometyliden = benzyliden*	C_6H_5-CH=	P-29.6.1; P-29.6.2.1
fenylmetylidyn = benzylidyn*	C_6H_5-C≡	P-29.6.1; P-29.6.2.1
fenyloksy: patrz fenoksy*		
fenylofosforochlorydoi l* = fenylo(chlorofosfonoil)	$(C_6H_5)ClP(O)$-	P-67.1.4.1.1.4

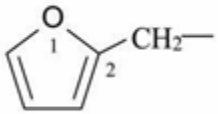
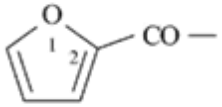
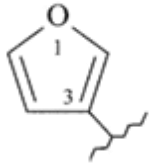
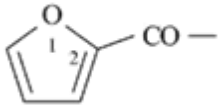
3-fenyloprop-2-enoil* = cynamoil	C_6H_5-CH=CH-CO-	P-67.1.7.3.1
fenyloselanyl* = fenyloseleno	C_6H_5-Se-	P-63.2.2.1.2; P-63.2.5
(fenyloselanylo)oksy*	C_6H_5-Se-O-	P-63.3.2
fenyloseleno: patrz fenyloselanyl*	C_6H_5-Se-	
fenyloselenonyl = benzenoselenonyl*	C_6H_5-SeO_2-	P-65.3.2.2.2
fenylosulfoamoil* = (fenyloamino)sulfonyl = anilinosulfonyl	C_6H_5-NH-SO_2-	P-66.1.1.4.2
fenylosulfanyl* = fenylotio	C_6H_5-S-	P-63.2.2.1.2; P-63.2.5
fenylo(sulfanylideno)metyl: patrz benzenokarbotioil		
(fenylosulfanylo)oksy*	C_6H_5-S-O-	P-63.3.2
fenylosulfinoselenoil = benzenosulfinoselenoil*	C_6H_5-S(Se)-	P-65.3.2.2.2
fenylosulfinyl = benzenosulfinyl*	C_6H_5-SO-	P-63.6; P-65.3.2.2.2
(fenylosulfinylo)amino = benzenosulfinoamido*	C_6H_5-SO-NH-	P-66.1.1.4.3
fenylosulfonyl = benzenosulfonyl*	C_6H_5-SO_2-	P-63.6; P-65.3.2.2.2
(fenylsulfonylo)amino = benzenosulfonoamido	C_6H_5-SO_2-NH-	P-66.1.1.4.3
fenylotellanyl* = fenylotelluro	C_6H_5-Te-	P-63.2.2.1.2; P-63.2.5
(fenylotellanylo)oksy*	C_6H_5-Te-O-	P-63.3.2
fenylotelluro: patrz fenylotellanyl*		
fenylotio: patrz fenylosulfanyl*		

fenylo(tiokso)metyl: patrz benzenokarbotioil*		
2-fenylowinyl: patrz 2-fenyloetenyl*		
fluoro*	F-	P-61.3.1
fluorozyl*	OF-	P-61.3.2.3
fluoryl*	O_2F-	P-61.3.2.3
formamido* = formyloamino	HCO-NH-	P-66.1.1.4.3
formazan-1-yl-5-ylidene*		P-68.3.1.3.5.2
formazan-3-yl-5-ylidene*		P-68.3.1.3.5.2
formimidoil = metanoimidoil* = iminometyl	HC(=NH)-	P-65.1.7.2.2
formimidoiloamino = metanoimidoamido* = (iminometylo)amino	HC(=NH)-NH-	P-66.4.1.3.3
formohydrazydo* = 2-formylohydrazyn-1-yl	OHC-NH-NH-	P-66.3.5.3
formohydrazonoil = metanohydrazonoil* = hydrazynylidenometyl	HC(=N-NH_2)-	P-65.1.7.2.2
formyl* = metanoil = oksometyl	HCO-	P-65.1.7.2.1; P-66.6.3
formyloamino = formamido*	HCO-NH-	P-66.1.1.4.3
formyloazanodiyl*	HCO-N<	P-66.1.1.4.3
formyloazanoyliden* (nie formyloimino)	HCO-N=	P-66.1.1.4.3

2-formylohydrazyn-1-yl = formohydrazydo*	OHC-NH-NH-	P-66.3.5.3
formyloimino: patrz formyloazanoyliden*		
formyloksy*		
formylosulfanyl*		
fosfanodiyl* (nie fosfinodiyl)	HP<	P-68.3.2.3.2.2
fosfanotriyl* (nie fosfinotriyl)	-P<	P-68.3.2.3.2.2
fosfaniumyl* = fosfonio = fosfoniumyl	H_3P^+-	P-73.6
fosfanyl* = fosfino	H_2P-	P-29.3.1; P-68.3.2.3.2.2
λ^5-fosfanyl* = fosforanyl	H_4P-	P-68.3.2.3.2.2
fosfanyliden*	HP=	P-29.3.1; P-68.3.2.3.2.2
fosfanylylidene*	-P=	P-68.3.2.3.2.2
fosfinano-3,5-diyl*		P-29.3.3
fosfinodiyl: patrz fosfanodiyl*		
fosfinotriyl: patrz fosfanotriyl*		
fosfinoimidoil* = imidofosfinoil	$H_2P(=NH)$-	P-67.1.4.1.1.4
fosfino: patrz fosfanyl*		
fosfinotioil* = tiofosfinoil	$H_2P(S)$-	P-67.1.4.1.1.2; P-67.1.4.1.2

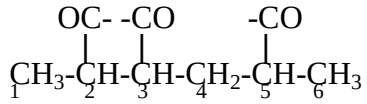
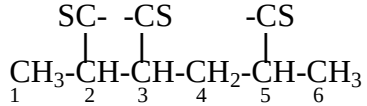
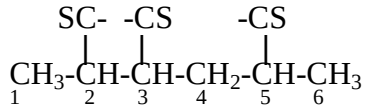
fosfinoil* = dihydrofosforyl (nie fosfinyl)	$H_2P(O)$-	P-67.1.4.1.1.4
fosfinyl: patrz fosfinoil*		
fosfo: patrz diokso-λ^5-fosfanyl*		
fosfoniano*	$(^-O)_2P(O)$-	P-72.6.1
fosfonio = fosfaniumyl* = fosfoniumyl	H_3P^+-	P-73.6
fosfoniumyl: patrz fosfaniumyl*		
fosfono*	$(HO)_2P(O)$-	P-67.1.4.1.1.1
fosfonooksy*	$(HO)_2P(O)$-O-	P-67.1.4.1.3
fosfonotioil* = hydro(tiofosforyl)	HP(S)<	P-67.1.4.1.2
fosfonoil* = hydrofosforyl	HP(O)<	P-67.1.4.1.1.2; P-67.1.4.1.2
fosforoamidochlorydoil* = amido(chlorydo)fosforyl	$(H_2N)ClP(O)$-	P-67.1.4.1.1.4
fosforanyl = λ^5-fosfanyl*	H_4P-	P-68.3.2.3.2.2
fosforocyjanidoizocyjanianotioil* = cyjano(izocyjaniano)fosforotioil = cyjano(izocyjaniano)(tiofosforyl)	(OCN)(NC)PS-	P-67.1.4.1.1.4
fosforodichloridoil* = dichlorofosforyl	$Cl_2P(O)$-	P-67.1.4.1.1.4
fosforohydrazydoimidoil* = hydrazydoimidofosforyl	$(H_2N\text{-}NH)P(=NH)<$	P-67.1.4.1.1.4
fosforonitridoil* = nitrydofosforyl	N≡P<	P-67.1.4.1.1.4

fosforoperoksoil* = peroksyfosforyl = hydroperoksyfosforyl	(HOO)P(O)<	P-67.1.4.1.1.4
fosforozo*: patrz oksofosfanyl		
fosforo(tioperoksoil)* = (tioperoksy)fosforyl	(HSO)P(O)< lub (HOS)P(O)<	P-67.1.4.1.1.4
fosforotioil* = tiofosforyl	-P(S)<	P-67.1.4.1.1.4
fosforyl*	-P(O)<	P-67.!.4.1.1.2
ftaloil = benzeno-1,2-dikarbonyl* = 1,2-fenylenodikarbonyl = 1,2-fenylenobis(oksometylen)		P-65.1.7.3.1; P-65.1.7.4.2
fulminiano: patrz (λ2-metylidenoamino)oksy*		
fumaroil = (2*E*)-but-2-enodioil* = (2*E*)-1,4-dioksobut-2-eno-1,4-diyl		
furano-2-karbonyl* = 2-furoil = 2-furylokarbonyl (także isomer 3-)		P-65.1.7.4.2; P-65.1.7.3.1
furan-3-yl* = 3-furyl (także isomer 2-)		P-29.6.2.3

furan-2-ylometyl* (nie furfuryl)		P-29.6.2.3
furfuryl (tylko isomer 2-): patrz furan-2-ylometyl*		
2-furoil = furano-2-karbonyl* = 2-furylokarbonyl (także isomer 3-)		P-65.1.7.4.2; P-65.1.7.3.1
3-furyl = furan-3-yl* (także izomer 2-)		P-29.6.2.3
2-furylokarbonyl = furano-2-karbonyl* = 2-furoil (także izomer 3-)		P-65.1.7.4.2; P-65.1.7.3.1
gallanyl*	H_2Ga-	P-29.3.1; P-68.1.2
germanodiyl* (nie germylene)	$H_2Ge<$	P-68.2.2
germanodiyliden*	=Ge=	P-68.2.2
germanotetrayl*	>Ge<	P-68.2.2
germanotriyl*	-GeH<	P-68.2.2
germanyl = germyl*	H_3Ge-	P-29.3.1; P-68.2.2

germanyliden = germyliden*	$H_2Ge=$	P-29.3.1; P-68.2.2
germanylidyn = germylidyn*	$HGe\equiv$	P-29.3.1; P-68.2.2
germanyliliden*	-GeH=	P-68.2.2
germyl* = germanyl	H_3Ge-	P-29.3.1; P-68.2.2
germylene: patrz germanodiyl		
germyliden* = germanyliden	$H_2Ge=$	P-29.3.1; P-68.2.2
germylidyn* = germanylidyn	$HGe\equiv$	P-29.3.1; P-68.2.2
glutaryl = pentanodioil* = 1,5-dioksopentano-1,5-diyl	-CO$[CH_2]_3$-CO-	P-65.1.7.3.1
guanidyno: patrz karbamimidoylamino*		

heksadekanoil* = palmitoil = oksoheksadecyl	CH_3-$[CH_2]_{14}$-CO-	P-65.1.7.3.1
heksadekan-1-yl = heksadecyl*	CH_3-$[CH_2]_{14}$-CH_2-	P-29.3.2.2; P-29.3.2.1
heksadecyl* = heksadekan-1-yl	CH_3-$[CH_2]_{14}$-CH_2-	P-29.3.2.1; P-29.3.2.2
heksametylene: patrz heksane-1,6-diyl*		
heksanodioil* = adipoil = 1,6-dioksoheksano-1,6-diyl	-CO-$[CH_2]_4$-CO-	P-65.1.7.4.1
heksano-1,6-diyl* (nie heksametylen)	-CH_2-$[CH_2]_4$-CH_2-	P-29.3.2.2

heksano-2,3,5-trikarbonyl* = heksano-2,3,5-triylotrikarbonyl = heksano-2,3,5-triylotris(oksometylen)		P-65.1.7.4.2
heksano-2,3,5-trikarbotioil* = heksano-2,3,5-tris(sulfanylidenometylen) = heksano-2,3,5-triylotris(tiometylen)		P-65.1.7.4.2
heksano-2,3,5-tris(sulfanylidenometylen) = heksano-2,3,5-trikarbonotioil*		P-65.1.7.4.1
heksano-2,3,5-triylokarbonyl: patrz heksano-2,3,5-trikarbonyl*		
heksano-2,3,5-triylotris(sulfanylidenometylen): patrz heksano-2,3,5-trikarbotioil*		
heksano-2,3,5-triyltris(tioksometylen): patrz heksano-2,3,5-trikarbotioil*		
heksanoil* = 1-oksoheksyl	CH_3-$[CH_2]_4$-CO-	P-65.1.7.4.1
heksan-1-yl = heksyl*	CH_3-$[CH_2]_5$-	P-29.3.2.2; P-29.3.2.1
heksan-1-ylidene = heksyliden*	CH_3-$[CH_2]_4$-CH=	P-29.3.2.2; P-29.3.2.1
heksanylidyne = heksylidyn*	CH_3-$[CH_2]_4$-C≡	P-29.3.2.2; P-29.3.2.1
heksyl* = heksan-1-yl	CH_3-$[CH_2]_5$-	P-29.3.2.1; P-29.3.2.2

heksyliden* = heksan-1-yliden	CH_3-$[CH_2]_4$-CH=	P-29.3.2.1; P-29.3.2.2
heksylidyn* = heksanylidyn	CH_3-$[CH_2]_4$-C≡	P-29.3.2.1; P-29.3.2.2
heptanoil* = 1-oksoheptyl	CH_3-$[CH_2]_5$-CO-	P-65.1.7.4.1
heptan-1-yl = heptyl	CH_3-$[CH_2]_5$-CH_2-	P-29.3.2.2; P-29.3.2.1
heptan-1-yliden = heptyliden*	CH_3-$[CH_2]_5$-CH=	P-29.3.2.2; P-29.3.2.1
heptanylidyn = heptylidyn*	CH_3-$[CH_2]_5$-C≡	P-29.3.2.2; P-29.3.2.1
heptyl* = heptan-1-yl	CH_3-$[CH_2]_5$-CH_2-	P-29.3.2.1; P-29.3.2.2
heptyliden* = heptan-1-yliden	CH_3-$[CH_2]_5$-CH=	P-29.3.2.1; P-29.3.2.2
heptylidyn* = heptan-1-ylidyn	CH_3-$[CH_2]_5$-C≡	P-29.3.2.1; P-29.3.2.2
hydrazo: nie używać w tworzeniu nazw heterocykli		
hydrazono: patrz hydrazynyliden*		
hydrazonometyliden = hydrazynylidenometyliden*	H_2N-N=C=	P-65.2.1.8
hydrazonostyboryl = styborahydrazonoil*	-Sb(=N-NH_2)<	P-67.1.4.1.1.4
hydrazynokarbohydrazyd* = 2-(hydrazynokarbonylo)hydrazyn-1-yl = 2-(hydrazynylokarbonylo)hydrazyn-1-yl	H_2N-NH-CO-NH-NH-	P-66.3.5.3; P-68.3.1.2.6.1

2-(hydrazynokarbonylo)hydrazyn-1-yl = hydrazynokarbohydrazyd* = 2-(hydrazynylokarbonylo)hydrazyn-1-yl	H_2N-NH-CO-NH-NH	P-68.3.1.2.6; P-66.3.5.3
(hydrazynokarbonylo)hydrazynyliden* = (hydrazynylokarbonylo)hydrazinyliden	H_2N-NH-CO-NH-N=	P-68.3.1.2.6
hydrazynokarboksyimidoil* = hydrazynylo(imino)metyl = *C*-hydrazynylokarbonoimidoil = karbonohydrazoimidoil (nie karbazyimidoil; nie *C*-hydrazynokarbonoimidoil)	H_2N-NH-C(=NH)-	P-66.4.2.3.1
hydrazino-1,2-diyl* = diazano-1,2-diyl (nie hydrazo)	-NH-NH-	P-29.3.2.2; P-68.3.1.2.1
hydrazynodiyliden* = diazanodiyliden (nie azino)	=N-N=	P-29.3.2.2; P-68.3.1.2.1
hydrazynosulfinyl* = hydrazynylosulfinyl (nie hydrazynosulfinyl)	H_2N-NH-SO-	P-66.3.2.1
hydrazynosulfonyl: patrz hydrazynylosulfonyl*		
hydrazynyl* = diazanyl (nie hydrazyno)	H_2N-NH-	P-29.3.2.2; P-68.3.1.2.1
C-hydrazynylokarbonohydrazonoil = hydrazynokarbohydrazonoil* = hydrazynylo(hydrazynylideno)metyl	H_2N-NH-C(=N-NH_2)-	P-66.4.3.4.1

hydrazynylokarbonyl = hydrazynokarbonyl* = karbonohydrazydoil	H_2N-NH-CO-	P-66.3.2.1
(hydrazynylokarbonylo)diazenyl = (hydrazynokarbonylo)diazenyl*	H_2N-NH-CO-N=N-	P-68.3.1.3.4
2-(hydrazynylokarbonylo)hydrazyn-1-yl = hydrazynokarbohydrazydo* = 2-(hydrazynokarbonylo)hydrazyn-1-yl	H_2N-NH-CO-NH-NH-	P-66.3.5.3
hydrazynylo(hydrazynylideno)metyl = hydrazynokarbohydrazonoil* = *C*-hydrazynylokarbonohydrazonoil	H_2N-NH-C(=N-NH_2)-	P-66.4.3.4.1
hydrazynyliden* = diazenylidene (nie hydrazono)	H_2N-N=	P-29.3.2.2; P-68.3.1.2.1
hydrazynylideno(amino)metyl = karbamohydrazonoil*	H_2N-C(=NH-NH_2)-	P-66.4.2.3
1-hydrazynylidenoetyl = etanohydrazonoil* = acetohydrazonoil	CH_3-C(=N-NH_2)-	P-65.1.7.2.2
hydrazynylideno(hydroksy)metyl = *C*-hydroksykarbonohydrazonoil*	HO-C(=N-NH_2)-	P-65.1.3.2.2
hydrazynylidenometyl = metanohydrazonoil* = formohydrazonoil	HC(=N-NH_2)-	P-65.1.7.2.2
(hydrazynylidenometylo)amino = metanohydrazonoamido*	HC(=N-NH_2)-NH-	P-66.4.2.3.3

(hydrazynylidenometylo)diazenyl*	HC(=N-NH_2)-N=N-	P-68.3.1.3.5.2
2-(hydrazynylidenometylo)hydrazyn-1-yl = metanohydrazonohydrazydo* = 2-(metanohydrazonoil)hydrazyn-1-yl	HC(=N-NH_2)-NH-NH-	P-66.4.3.4.2
hydrazynylidenometyliden* = diazenylidenometyliden = hydrazonometyliden	H_2N-N=C=	P-65.2.1.8
1-hydrazynylidenoprop-2-en-1-yl = prop-2-enohydrazonoil* = akrylohydrazonoil	CH_2=CH-C(=N-NH_2)-	P-65.1.7.3.2
hydrazynylo(imino)metyl = hydrazynokarboksyimidoil* = karbonohydrazydoimidoil = *C*-hydrazynylokarbonoimidoil	H_2N-NH-C(=NH)-	P-66.4.2.3.1
hydrazynylosulfonyl = hydrazynosulfonyl*	H_2N-NH-SO_2-	P-66.3.2.1
hydroarsoryl = arsonoil*	HAsO<	P-67.1.4.1.2
hydrofosforyl = fosfonoil*	HPO<	P-67.1.4.1.2
hydrometoksyboryl: patrz metoksyboranyl		
hydronitroryl = azonoil*	HNO<	P-67.1.4.1.2
hydroperoksy*	HOO-	P-63.4.2.2
hydroperoksykarbonyl = karbonoperoksoil*	HOO-CO-	P-65.2.1.5

hydroperoksyfosforyl = fosforoperoksoil* = peroksyfosforyl	HOO-PO<	P-67.1.4.1.1.4
hydroseleno: patrz selanyl*		
hydroselenonyl*	HSeO-	P-65.3.2.3
hydrostyboryl = stybonoil*	HSbO<	P-67.1.4.1.2
hydrosulfinyl*	HSO-	P-65.3.2.3
hydrosulfonyl*	HSO_2	P-65.3.2.3
hydrotelluro: patrz tellanyl*		
hydro(tiofosforyl) = fosfonotioil*	HPS<	P-67.1.4.1.2
hydroksy* (nie oksydanyl)	HO-	P-63.1.4
N-hydroksyacetimidoil = *N*-hydroksyetanoimidoil* = acetohydroksymoil	$CH_3C(=N-OH)$-	P-65.1.7.2.2
hydroksyamino* (nie hydroksyloamino)	HO-NH-	P-68.3.1.1.1.5
hydroksyarsanyl*	(HO)AsH-	P-67.1.4.1.1.6
hydroksyarsoryl*	(HO)AsO<	P-67.1.4.1.1.5
hydroksyazanodiyl*	HO-N<	P-68.3.1.1.1.5
hydroksyazonoil*	(HO)HNO-	P-67.1.4.1.1.5

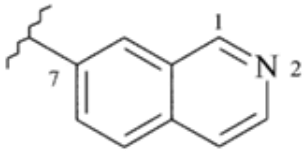
N-hydroksybenzenokarboksymidoil* = *N*-hydroksybenzimidoil = benzenokarbohydroksymoil	C_6H_5-C(=N-OH)-	P-65.1.7.2.2
N-hydroksybenzimidoil = *N*-hydroksybenzenokarboksyimidoil* = benzenokarbohydroksymoil	C_6H_5-C(=N-OH)-	P-65.1.7.2.2
hydroksybis(sulfanylideno)etyl = hydroksyl(sulfanylideno)etanetioil* (nie 1,2-ditiooksalo)	HO-CS-CS-	P-65.1.7.2.4
hydroksyboranyl*	(HO)HB-	P-67.1.4.2
N-hydroksyetanoimidoil* = *N*-hydroksyacetoimidoil = acetohydroksymoil	CH_3C(=N-OH)-	P-65.1.7.2.2
hydroksyfosfanyliden*	HO-P=	P-67.1.4.1.1.6
hydroksyfosforyl*	HO-P(O)<	P-67.1.4.1.1.5
hydroksyimino*	HO-N=	P-68.3.1.1.2
[hydroksy(imino)metylo]amino = (*C*-hydroksykarbonoimidoilo)amino* (nie 1-izoureido)	HO-C(=NH)-NH-	P-66.1.6.1.2.2
C-hydroksykarbonohydrazonoil* = hydrazynylideno(hydroksy)metyl [nie hydrazono(hydroksy)metyl]	HO-C(=N-NH_2)-	P-65.1.3.2.2
hydroksykarbonotioil*	HO-CS-	P-65.2.1.6

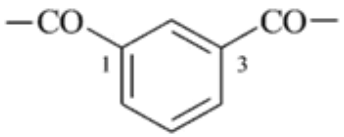
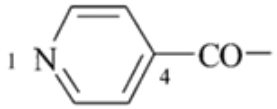
(hydroksykarbonotioilo)karbonyl* = hydroksy(tiokarbonylo)karbonyl (nie 2-hydroksy-2-tiooksalil)	HO-CS-CO-	P-65.1.7.2.4
hydroksyloamino: patrz hydroksyamino*		
hydroksy(merkapto)fosforyl: patrz hydroksy(sulfanylo)fosforyl*		
hydroksy(metylo)boranyl*	CH_3(HO)B-	P-68.1.4.2
hydroksy(metylofosfonyl)* = hydroksy(metylo)fosforyl	CH_3-P(O)(OH)-	P-67.1.4.1.1.5
hydroksy(metylo)fosforyl = hydroksyl(metylo)fosfonoil*	CH_3-P(O)(OH)	P-67.1.4.1.1.5
hydroksy(okso)acetyl: patrz oksalo*		
hydroksy(okso)-λ^5-arsanyliden	HO-As(O)=	P-67.1.4.1.1.6
hydroksy(okso)-λ^5-azanyliden* = *aci*-nitro	HO-N(O)=	P-61.5.4; P-67.1.4.1.1.6; P-67.1.6
hydroksy(okso)-λ^5-fosfanyliden*	HO-P(O)=	P-67.1.4.1.1.6
hydroksy(okso)-λ^5-stybanodiyl = hydroksystyboryl*	HO-Sb(O)<	P-67.1.4.1.1.5
hydroksy(okso)-λ^5-stybanyliden	HO-Sb(O)=	P-67.1.4.1.1.6
hydroksyselanyl* (nie seleneno)	HO-Se-	P-63.4.2.2

(hydroksyselanylo)metyl* = (*OSe*-selenohydroperoksy)metyl	(HOSe)-CH_2-	P-63.4.2.2
hydroksystybanodiyl*	HO-Sb<	P-67.1.4.1.1.6
hydroksystyboryl* = hydroksy(okso)-λ^5-stybanodiyl	HO-SbO<	P-67.1.4.1.1.6; P-67.1.4.1.1.5
hydroksysulfanyl* = *OS*-tiohydroperoksy (nie sulfeno; nie hydroksytio)	HO-S-	P-63.4.2.2
hydroksy(sulfanylo)boranyl = tioborono*	(HO)(HS)B-	P-68.1.4.2
(hydroksysulfanylo)karbonoselenoil* = (*OS*-tiohydroperoksy)karbonoselenoil	(HOS)-C(Se)-	P-65.2.1.7
(hydroksysulfanylo)karbonyl* = (*OS*-tiohydroperoksy)karbonyl	(HOS)-CO-	P-65.1.5.3; P-65.2.1.7
hydroksy(sulfanylideno)acetyl* (nie 2-hydroksy-2-tiooksalo)	HO-CS-CO-	P-65.1.7.2.4
hydroksy(sulfanylideno)etanotioil = hydroksybis(sulfanylideno)etyl* (nie 1,2-ditiooksalo)	HO-CS-CS-	P-65.1.7.2.4
(hydroksysulfanylo)fosforotioil* = (*OS*-tiohydroperoksy)fosforotioil	(HOS)-P(S)<	P-67.1.4.1.1.5
hydroksy(sulfanylo)fosforyl* [nie hydroksyl(merkapto)fosforyl]	(HO)(HS)P(O)-	P-67.1.4.1.1.5

hydroksysulfonotioil*	HO-S(O)(S)-	P-65.3.2.3
hydroksytellanyl* = *OTe*-tellurohydroperoksy = tellureno	HO-Te-	P-63.4.2.2
hydroksytio: patrz hydroksysulfanyl*		
hydroksy(tiokarbonylo)karbonyl = hydroksy(karbonotioilo)karbonyl*	HO-CS-CO-	P-65.1.7.2.4
2-hydroksy-2-tiooksalil: patrz hydroksyl(karbonotioilo)karbonyl*		

imidoarsoryl = arsoroimidoil*	-As(=NH)<	P-67.1.4.1.1.4
imidofosfinoil = fosfinoimidoil*	H_2P(=NH)-	P-67.1.4.1.1.4
imino* (nie azanyliden) (patrz także azanodiyl*)	HN=	P-62.3.1.2
1-iminobutyl = butanoimidoil* = butyroimidoil	CH_3-CH_2-CH_2-C(=NH)-	P-65.1.7.4.1
1-iminoetyl = etanoimidoil* = acetimidoil	CH_3-C(=NH)-	P-65.1.7.2.2
iminometyl = metanoimidoil* = formimidoil	HC(=NH)-	P-65.1.7.2.2
(iminometylo)amino = metanoimidoamido* = formimidoiloamino	HN=CH-NH-	P-66.4.1.3.3
[imino(sulfanylo)metylo]amino = (*C*-sulfanylokarbonoimidoilo)amino*	HS-C(=NH)-NH-	P-66.1.6.1.3.3
1-imino-2-selanylidenoetano-1,2-diyl*	-C(=NH)-C(Se)-	P-65.1.7.5

1-iminopropyl = propanoimidoil* = propionoimidoil	CH_3-CH_2-C(=NH)-	P-65.1.7.4.1; P-65.1.7.3.2
imino(fenylo)metyl = benzenokarboksyimidoil* = benzimidoyl	C_6H_5-C(=NH)-	P-65.1.7.2.2
iminometyliden*	HN=C=	P-65.2.1.8
indyganyl*	H_2In-	P-29.3.1; P-68.1.2
iodozo: patrz iodozyl*		
iodozyl* (nie iodozo)	OI-	P-61.3.2.3
iodyl*	O_2I-	P-61.3.2.3
izobutoksy: patrz 2-metylopropoksy*		
izobutyl: patrz 2-metylopropyl*		
izochinolin-7-yl* = 7-izochinolil (także izomery 1,3,4,5,6 i 8) 7-izochinolil = izochinolin-7-yl* (także izomery 1,3,4,5,6 i 8)		P-29.3.4
izocyjaniano*	OCN-	P-61.8
izocyjanianosulfonyl* = sulfuroizotiocyjanianoil	(SCN)-SO_2-	P-67.1.4.4.1
izocyjano*	CN-	P-61.9

izoftaloil = benzeno-1,3-dikarbonyl* = 1,3-fenylenodikarbonyl = 1,3-fenylenobis(oksometylen)		P-65.1.7.3.1; P-65.1.7.4.2
izofulminiano: patrz (okso-λ^5-azanylideno)metyl*		
izonikotynoil = pirydyno-4-karbonyl* = 4-pirydylokarbonyl		P-65.1.7.3.1; P-65.1.7.4.2
izopentyl: patrz 3-metylobutyl*		
izopropenyl = prop-1-en-2-yl* = 1-metyloeten-1-yl	$CH_2=C(CH_3)$-	P-32.1.1; P-32.3
izopropoksy = (propan-2-yl)oksy* = 1-metyloetoksy	$(CH_3)_2CH$-O	P-63.2.2.2
izopropyl = propan-2-yl* = 1-metyloetyl	$(CH_3)_2CH$-	P-29.6.2.2; P-29.3.2.2; P-29.4.1
izopropyliden = propan-2-yliden* = 1-metyloetyliden	$(CH_3)_2C=$	P-29.6.2.2
izoselenocyjaniano*	SeCN-	P-61.8
izotellurocyjaniano*	TeCN-	P-61.8
izotiocyjaniano*	SCN-	P-67.1.4.4.1
izotiocyjanianosulfonotioil* = sulfuro(izotiocyjaniano)tioil	(SCN)-S(O)(S)-	P-67.1.4.4.1

izotiocyjanianosulfonyl* = sulfuroisotiocyjanianoil	(SCN)-SO_2-	P-67.1.4.1.1
1-izoureido: patrz (*C*-hydroksykarbonoimidoilo)amino*		
3-izoureido: patrz [(aminohydroksy)metylideno]amino*		

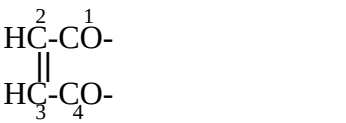
karbamohydrazonoil* = hydrazynylideno(amino)metyl	H_2N-C(=N- NH_2)-	P-66.4.2.3.2
karbamoil* = aminokarbonyl	H_2N-CO-	P-65.2.1.5; P-66.1.1.4.1.1
karbamoiloamino* = (aminokarbonylo)amino (nie ureido)	H_2N-CO-NH-	P-66.1.6.1.1.3
karbamoiloformamido = oksamoiloamino* = amino(okso)acetamido	H_2N-CO-CO-NH-	P-66.1.1.4.5.1
karbamoiloformyl: patrz oksamoil*		
2-karbamoilohydrazyn-1-yl* = 2-(aminokarbonylo)hydrazyn-1-yl = semikarbazydo	H_2N-CO-NH-NH-	P-68.3.1.2.4
karbamoilohydrazynyliden* = semikarbazono	H_2N-CO-NH-N=	P-68.3.1.2.5
karbamoilokarbamoil* = [(aminokarbonylo)amino]karbonyl	H_2N-CO-NH-CO-	P-66.1.6.1.1.4

karbamoilokarbonyl: patrz oksamoil*	H_2N-CO-NH-CO-	P-66.1.6.1.1.4
karbamoimidoamido = karbamoimidoiloamino* = [amino(imino)metylo]amino (nie guanidyno)	H_2N-C(=NH)-NH-	P-66.4.1.2.1.3
karbamoimidoil* = *C*-aminokarbonoimidoil = amino(imino)metyl (nie amidino)	H_2N-C(=NH)-	P-65.2.1.5; P-66.4.1.3.1
karbamoimidoiloamino* = karbamoimidoamido = [amino(imino)metylo]amino (nie guanidino)	H_2N-C(=NH)-NH-	P-66.4.1.2.1.3
karbamotioil* = aminokarbonotioil = amino(sulfanylideno)metyl (nie tiokarbamoil)	H_2N-CS-	P-65.2.1.5; P-66.1.4.4
karbamotioiloamino* = [amino(sulfanylideno)metylo]amino	H_2N-CS-NH-	P-66.1.6.1.3.3
karbazono: patrz diazenokarbohydrazydo*		
karbazoil : patrz hydrazynokarbonyl		
karboetoksy: patrz etoksykarbonyl*		
karboksy*	HOOC-	P-65.1.2.2.3; P-65.2.1.6
karboksyamino*	HOOC-NH-	P-65.2.1.6
karboksyformyl: patrz oksalo*		
(karboksyformylo)oksy: patrz oksalooksy*		
(karboksyformylo)sulfanyl: patrz oksalosulfanyl*		
(karboksyformylo)tio: patrz oksalosulfanyl*		

karboksykarbonotioil = karboksymetanotioil*	HOOC-CS-	P-65.1.7.2.4
(karboksykarbonotioilo)sulfanyl = (karboksymetanotioilo)sulfanyl*	HOOC-CS-S-	P-65.1.7.2.4
karboksykarbonyl = oksalo* = hydroksy(okso)acetyl (nie karboksyformyl)	HOOC-CO-	P-65.1.7.2.1
(karboksykarbonylo)amino = oksaloamino*	HOOC-CO-NH-	P-65.1.7.2.4
(karboksykarbonylo)oksy = oksalooksy*	HOOC-CO-O-	P-65.1.7.2.4
(karboksykarbonylo)sulfanyl = oksalosulfanyl*	HOOC-CO-S-	P-65.1.7.2.4
(karboksykarbonylo)tio = oksalosulfanyl*	HOOC-CO-S-	P-65-1.7.2.4
karboksylan*	$^{-}$O-CO-	P-72.6.1
karboksymetanotioil* = karboksykarbonotioil	HOOC-CS-	P-65.1.7.2.4
(karboksymetanotioilo)sulfanyl* = (karboksykarbonotioilo)sulfanyl	HOOC-CS-S-	P-65.1.7.2.4
3-karboksy-3-oksopropyl* (nie 2-oksaloetyl)	HOOC-CO-CH_2CH_2-	
karboksyoksy*	HOOC-O-	P-65.2.1.6
(karboksyoksy)karbonyl* [nie (karboksyoksy)formyl]	HOOC-O-CO-	P-65.2.3.1.5
(karboksyoksy)formyl: patrz (karboksyoksy)karbonyl*		
karboksysulfanyl* = karboksytio	HOOC-S-	P-65.2.1.6

karboksytio = karboksysulfanyl*	HOOC-S-	P-65.2.1.6
karbometoksy: patrz metoksykarbonyl*		
karbonobromidotioil* = bromokarbonotioil	Br-CS-	P-65.2.1.5
karbonochloroimidoil* *C*-chlorokarbonoimidoil	Cl-C(=NH)-	P-65.2.1.5
karbonochlorydoil* = chlorokarbonyl (nie chloroformyl)	Cl-CO-	P-65.2.1.5
karbonocyjanidoil* = cyjanokarbonyl	NC-CO-	P-65.2.1.5
karbonohydrazydoimidoil = hydrazynokarboksyimidoil* = hydrazynylo(imino)metyl = *C*-hydrazynylokarbonoimidoil (nie hydrazynokarbonoimidoil)	H_2N-NH-C(=NH)-	P-66.4.2.3.1
karbonohydrazydoil = hydrazynokarbonyl*	H_2N-NH-CO-	P-66.3.2.1
karbonohydrazonoil*	-C(=N-NH_2)-	P-65.2.1.5
karbonoimidoil	-C(=NH)-	P-65.2.1.5
karbononitrydoperoksy = cyjanoperoksy*	NC-OO-	P-65.2.2
karbononitrydoil = cyjano*	NC-	P-65.2.2
karbononitrydoilokarbonyl: patrz karbonocyjanidoil*		
karbononitrydoiloksy = cyjanian	NC-O-	P-65.2.2
karbononitrydoiloselanyl = selenocyjaniano*	NC-Se-	P-65.2.2

karbononitrydoilosulfanyl = tiocyjanian* =karbononitrydoilotio	NC-S-	P-65.2.2
karbononitrydoilotellanyl = tellurocyjanian*	NC-Te-	P-65.2.2
karbononitrydoilotio = tiocyjanian* = karbononitrydoilosulfanyl	NC-S-	P-65.2.2
karbonoperoksoil* = hydroperoksykarbonyl	HOO-CO-	P-65.2.1.5
karbono(tioperoksoil)* = (tiohydroperoksy)karbonyl	HO-S-CO- lub HS-O-CO-	P-65.2.1.7
karbonotioil* = tiokarbonyl	-CS-	P-65.2.1.5
karbonyl*	-CO-	P-65.2.1.5
karbonylobis(azanodiyl)* (nie ureilen)	-NH-CO-NH-	P-66.1.6.1.1.3
keto (nie należy używać): patrz okso*		
krotonyl: patrz but-2-enoil*		
2,3-ksylidyno: patrz 2,3-dimetyloanilino*		

maleoil = (2Z)-but-2-enedioil* (2Z)-1,4-dioksobut-2-eno-1,4-diyl		P-65.1.7.3.1
malonoimidoil = propanodiimidoil* = 1,3-diiminopropano-1,3-diyl	-C(=NH)-CH_2-C(=NH)-	P-65.1.7.4.1

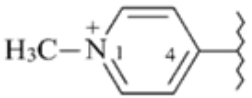
malonyl = propanedioil* = 1,3-dioksopropano-1,3-diyl	-CO-CH_2-CO-	P-65.1.7.3.1
merkapto: patrz sulfanyl*		
merkaptokarbonyl: patrz sulfanylokarbonyl*		
merkaptooksy: patrz sulfanyloksy*		
metakryloil = 2-metyloprop-2-enoil* = 2-metylo-1-oksoprop-2-en-1-yl	CH_2=C(CH_3)-CO-	P-65.1.7.3.1
metanidyl*	H_2C^--	P-72.6.3
metanodiyl: patrz metylene*		
metanohydrazonoamido* = metanohydrazonoiloamino = (hydrazynylidenometylo)amino	CH(=NH-NH_2)-NH-	P-66.4.2.3.3
metanohydrazonohydrazydo* = 2-metanohydrazonoilohydrazyn-1-yl = 2-(hydrazynylidenometylo)hydrazyn-1-yl	CH(=N-NH_2)-NH-NH-	P-66.4.3.4.2
metanohydrazonoil* = formohydrazonoil = hydrazynylidenometyl	HC(=N-NH_2)-	P-65.1.7.2.2
metanohydrazonoiloamino = metanohydrazonoamido* = (hydrazynylidenometylo)amino	CH(=N-NH_2)-NH-	P-66.4.2.3.3
2-metanohydrazonoilohydrazyn-1-yl = metanohydrazonohydrazydo* = 2-(hydrazynylidenometylo)hydrazyn-1-yl	CH(=N-NH_2)-NH-NH-	P-66.4.3.4.2

metanoil = formyl* = oksometyl	HCO-	P-65.1.7.2.1
metanoimidoamido* = (iminometylo)amino = formimidoiloamino	HC(=NH)-NH-	P-66.4.1.3.3
metanoimidoil* = formimidoil = iminometyl	HC(=NH)-	P-65.1.7.2.2
metanoseleninyl* = metyloseleninyl	CH_3-SeO-	P-65.3.2.2.2
metanoselenonyl* = metyloselenonyl	CH_3-SeO_2	P-65.3.2.2.2
metanoselenoil* = selenoformyl = selanylidenometyl	HCSe-	P-65.1.7.2.3; P-66.6.3
metanosulfinoamido* = metanosulfinyloamino	CH_3-SO-NH-	P-66.1.1.4.3
metanosulfinoimidoil* = *S*-metylosulfinoimidoil	CH_3-S(=NH)-	P-65.3.2.2.2
metanosulfinyl* = metylosulfinyl	CH_3-SO-	P-65.3.2.2.2
metanosulfinyloamino = metanosulfinoamido	CH_3-SO-NH-	P-66.1.1.4.3
metanosulfonoamido* = metanosulfonyloamino	CH_3-SO_2-NH-	P-66.1.1.4.3
metanosulfonoimidoil* = *S*-metylosulfonoimidoil	CH_3-S(=NH)(O)-	P-65.6.3.2.2.2
metanosulfonyl* = metylosulfonyl	CH_3-SO_2-	P-65.3.2.2.2
metanosulfonyloamino = metanosulfonoamido*	CH_3-SO_2-NH-	P-66.1.1.4.3
metanosulfonyloazanyliden: patrz metanosulfonyloimino		

metanosulfonyloimino* = (metylosulfonylo)imino (nie metanosulfonyloazanyliden)	CH_3-SO_2-N=	P-66.1.1.4.4
metanotelluroil* = telluroformyl = tellanylidenometyl	HC(Te)-	P-65.1.7.2.3; P-66.6.3
metanotetrayl*	>C<	P-29.3.1
metanotioil* = tioformyl = sulfanylidenometyl	HCS-	P-65.1.7.2.3
metanotioiloamino = metanotioamido* = tioformamido	HCS-NH-	P-66.1.4.4
metanotriyl*	-CH<	P-29.3.1
metanyl = metyl*	CH_3-	P-29.3.1
metanyliden = metyliden*	CH_2=	P-29.3.1
metanylidyn = metylidyn*	CH≡	P-29.3.1
metanylylidene*	-CH=	P-29.3.1
metoksy* = metyloksy	CH_3-O-	P-63.2.2.2
2-metoksyanilino* = (2-metoksyfenylo)amino (także izomery 3- i 4-metoksy) (nie anizydyno)	2-(CH_3-O)-C_6H_4-NH-	P-62.2.1.1.2
metoksyboranyl* (nie hydrometoksyboryl)	CH_3-O-BH-	P-67.1.4.2
metoksyboranyliden*	CH_3-O-B=	P-67.1.4.1.1.6
C-metoksykarbonoimidoil*	CH_3-O-C(=NH)-	P-65.2.1.5
metoksykarbonotioil*	CH_3-O-CS-	P-65.2.1.5

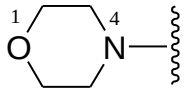
metoksykarbonyl* (nie karbometoksy)	CH_3O-CO-	P-65.6.3.2.3
metoksy(izocyaniano)fosforyl*	(CH_3-O)(OCN)P(O)-	P-67.1.4.1.1.5
metoksy(okso)-λ^5-arsanyliden*	CH_3-O-As(O)=	P-67.1.4.1.1.6
metoksysulfanyl* (nie metoksytio)	CH_3-O-S-	P-63.3.2
S-metoksysulfinoimidoil*	CH_3-O-S(=NH)-	P-65.3.2.3
(metoksysulfinylo)oksy*	CH_3-O-SO-O-	P-67.1.4.4.2
metoksysulfonyl* = metoksysulfuryl	CH_3-O-SO_2-	P-65.3.2.3; P-67.1.4.4.1
(metoksysulfonylo)amino*	CH_3-O-SO_2-NH-	P-67.1.4.4.2
metoksysulfuryl = metoksysulfonyl*	CH_3-O-SO_2-	P-65.3.2.3; P-67.1.4.4.1
metoksytio: patrz metoksysulfanyl*		
metyl* = metanyl	CH_3-	P-29.3.1
metylen (nie metanodiyl)	-CH_2-	P-29.6.1
(metyloamino)sulfinyl*	CH_3-NH-SO-	P-66.1.1.4.2
2-metylanilino* = (2-metylofenylo)amino) (także izomery 3- i 4-metyl) (nie *o*-toluidyno; nie 2-toluidyno)	2-CH_3-C_6H_4-NH-	P-62.2.1.1.2
metylenobis(oksy)* (nie metylenodioksy)	-O-CH_2-O-	P-63.2.2.1.3
metylenobis(sulfanodiyl)* = metylenobis(tio)	-S-CH_2-S-	P-63.2.2.1.3
metylenobis(tio) = metylenobis(sulfanyl)*		

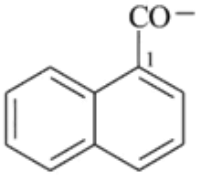
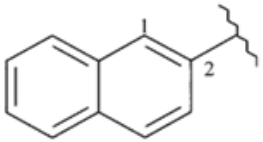
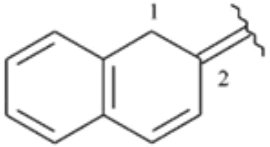
metylenodioksy: patrz metylenobis(oksy)*	-O-CH_2-O-	
(metyloboranylo)amino*	CH_3-BH-NH-	P-68.1.4.2
2-metylobutan-2-yl* = 1,1-dimetylopropyl (nie *tert*-pentyl)	CH_3-CH_2-C(CH_3)$_2$-	P-29.4.1; P-29.6.3
1-metylobutyl = pentan-2-yl*	CH_3-CH_2-CH_2-CH(CH_3)-	P-29.4.1; P-29.3.2.2
2-metylobutyl*	CH_3-CH_2-CH(CH_3)-CH_2-	P-29.4.1
3-metylobutyl* (nie izopentyl)	(CH_3)$_2$CH-CH_2-CH_2-	P-29.4.1
metyliden* = metanylidene	CH_2=	P-29.3.1
(λ^2-metylidenoamino)oksy* (nie fulminiano)	C=N-O-	P-61.10
metylidyn* = metanylidyn	CH≡	P-29.3.1
metylodioksy: patrz metyloperoksy*		
metylodiselanyl*	CH_3-Se-Se-	P-63.3.1
metylodisulfanyl* = metyloditio	CH_3-S-S-	P-63.3.1
metyloditellanyl*	CH_3-Te-Te-	P-63.3.1
metyloditio = metylodisulfanyl*	CH_3-S-S-	P-63.3.1
1-metyloetano-1,2-diyl = propano-1,2-diyl* (nie propylene)	-CH_2-C(CH_3)-	P-29.3.2.2
1-metyloetenyl = prop-1-en-2-yl* (nie izopropenyl)	CH_2=C(CH_3)-	P-32.1.1; P-32.3

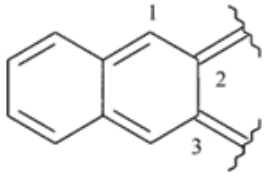
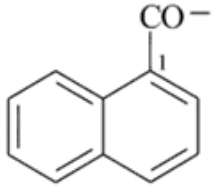
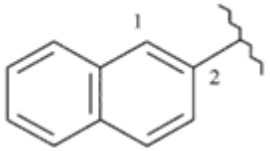
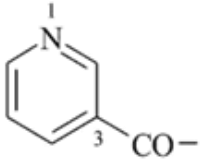
1-metyloetyl = propan-2-yl* = izopropyl	$(CH_3)_2CH$-	P-29.6.2.2; P-29.3.2.2; P-29.4.1
1-metyloetyliden = propan-2-yliden* = izopropyliden	$(CH_3)_2C$=	P-29.6.2.2
(1-metyloetylo)oksy = propan-2-yloksy* = izopropoksy	$(CH_3)_2CH$-O-	P-63.2.2.2
2-metylofenyl* = *o*-tolil (także izomery 3- i 4-metylo)	2-CH_3-C_6H_4-	P-29.6.2.3
(2-metylofenylo)amino = 2-metyloanilino* (także izomery 3- i 4-) (nie *o*-toluidyno; nie 2-toluidyno)	2-CH_3-C_6H_4-NH-	P-62.2.1.1.2
metylo(fenylo)arsynoil*	$(C_6H_5)(CH_3)$As(O)-	P-67.1.4.1.1.5
metylofosfonoil*	CH_3-P(O)<	P-67.1.4.1.1.3
2-metylo-1-oksoprop-2-en-1-yl = 2-metyloprop-2-enoil* = metakryloil	CH_2=C(CH_3)-CO-	P-65.1.7.3.1
metyloksy: patrz metoksy*		
metyloperoksy* (nie metylodioksy)	CH_3-OO-	P-63.3.1
1-metylopirydyn-1-ium-4-yl*		P-73.6

2-metylopropan-2-yl* = *tert*-butyl (niepodstawiony*) = 1,1-dimetyletyl	$(CH_3)_3C$-	P-29.4.1; P-29.6.1
2-metylopropan-2-ylium-1-yl*	CH_3-C^+-(CH_3)-CH_2-	P-73.6
(2-metylpropan-2-yl)oksy* = *tert*-butoksy (niepodstawiony*) = 1,1-dimetyloetoksy	$(CH_3)_3C$-O-	P-63.2.2.2
2-metylo-prop-2-enoil* = metakryloil = 2-metylo-1-oksoprop-2-en-1-yl	CH_2=C(CH_3)-CO-	P-65.1.7.3.1
1-metyloprop-2-en-1-yl = but-3-en-2-yl*	CH_2=CH-CH(CH_3)-	P-32.1.1
1-metylopropoksy = butan-2-yloksy* (nie *sec*-butoksy)	CH_3-CH_2-CH(CH_3)-O-	P-63.2.2.2
2-metylopropoksy* (nie izobutoksy)	CH_3-CH(CH_3)-CH_2-O-	P-63.2.2.2
1-metylopropyl = butan-2-yl* (nie *sec*-butyl)	CH_3-CH_2-CH(CH_3)-	P-29.4.1; P-29.3.2.2; P-29.6.3
2-metylopropyl* (nie izobutyl)	CH_3-CH(CH_3)-CH_2-	P-29.6.3
1-metylopropyliden = butan-2-yliden* (nie *sec*-butylidene)	CH_3-CH_2-C(CH_3)=	P-29.3.2.2; P-29.4.1; P-29-6.3
metyloselanyl* = metyloseleno	CH_3-Se-	P-63.2.5.1
metyloseleninyl = metanoseleninyl*	CH_3-SeO-	P-65.3.2.2.2
metyloseleno = metyloselanyl*	CH_3-Se-	P-63.2.5.1
metyloselenonyl = metanoselenonyl*	CH_3-SO_2-	P-65.3.2.2

metylosulfaniumodiyl* = metylosulfoniumodiyl	CH_3-S^+<	P-73.6
metylosulfanyl* = metyltio	CH_3-S-	P-63.2.2.1.2; P-63.2.5.1
(metylosulfanylo)oksy*	CH_3-SO-	P-63.3.2
S-metylosulfinoimidoilo = metanosulfinoimidoil*	CH_3-S(=NH)-	P-65.3.2.2.2
metylosulfinyl = metanosulfinyl*	CH_3-SO-	P-65.3.2.2.2
S-metylosulfonoimidoil = metanosulfonoimidoil*	CH_3-S(=NH)(O)-	P-65.3.2.2.2
metylosulfoniumodiyl = metylosulfaniumodiyl*	CH_3-S^+<	P-73.6
metylosulfonyl = metanosulfonyl*	CH_3-SO_2-	P-65.3.2.2.2
(metylosulfonylo)imino = (metanosulfonylo)imino*	CH_3-SO_2-N=	P-66.1.1.4.4
(metylosulfanylo)sulfonyl* = (metylotio)sulfonyl	CH_3-S-SO_2-	P-65.3.2.3
metylotellanyl* (nie metylotelluro)	CH_3-Te-	P-63.2.5
metylotelluro: patrz metylotellanyl*		
1-metylotetrasilan-1-yl*	SiH_3-SiH_2-SiH_2-$SiH(CH_3)$-	P-29.4.1
metylotio = metylosulfanyl*	CH_3-S-	P-63.2.2.1.2; P-63.2.5.1
(metylotio)oksy: patrz (metylosulfanylo)oksy		

(metylotio)sulfonyl = (metylosulfanylo)sulfonyl*	CH_3-S-SO_2-	P-65.6.3.3.1
metylotrisulfanyl* = metylotritio	CH_3-S-S-S-	P-68.4.1.3
metylotritio = metylotrisulfanyl*	CH_3-S-S-S-	P-68.4.1.3
morfolino: patrz morfolin-4-yl*		
morfolin-4-yl* (nie morfolino)		P-29.3.3

naftaleno-1-karbonyl* = 1-naftoil = 1-naftylokarbonyl = naftalen-1-yl(okso)metyl (także isomer 2-)		P-65.1.7.3.1; P-65.1.7.4.2
naftalen-2-yl* = 2-naftyl (także isomer 1-)		P-29.3.4.1; P-29.6.2.3
naftalen-2(1*H*)-ylidene* (także isomer 1(2*H*)-		P-29.3.4.1

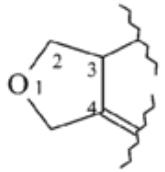
naftaleno-2,3-diylidene*		P-29.3.4.1
1-naftoil = naftaleno-1-karbonyl* = 1-naftylokarbonyl = naftalen-1-ylo(okso)metyl (także isomer 2-) 1-naftylokarbonyl: patrz naftaleno-1-karbonyl* (także izomer 2-)		P-65.1.7.3.1; P-65.1.7.4.2
2-naftyl = naftaleno-2-yl* (także izomer 1-)		P-29.3.4.1; P-29.6.2.3
neopentyl: patrz 2,2-dimetylopropyl*		
nikotynoil = pirydyno-3-karbonyl* = 3-pirydylokarbonyl = okso(pirydyn-3-ylo)metyl		P-65.1.7.3.1; P-65.1.7.4.2
nitro*	O_2N-	P-61.5.1
aci-nitro: patrz hydroksylo(okso)-λ^5-azanylidene*		
nitroamido* (nie nitroamino)	O_2N-NH-	P-67.1.4.3.2
nitroamino: patrz nitroamido*		

nitroazanodiyl*	O_2N-N<	P-67.1.4.3.2
1-nitrohydrazyn-1-yl*	H_2N-N(NO_2)-	P-67.1.4.3.3
2-nitrohydrazyn-1-yl*	O_2N-NH-NH-	P-67.1.4.3.3
nitroimino*	O_2N-N=	P-67.1.4.3.2
nitrooksy*	O_2N-O-	P-67.1.4.3.1
nitroryl* (nie azoryl)		
nitrozoselenyl*	ON-Se-	P-67.1.4.3.1
nitrosulfanyl*	O_2N-S-	P-67.1.4.3.1
nitrozo*	O=N-	P-61.5.1
nitrozoamino*	ON-NH-	P-67.1.4.3.2
nitrozohydrazynyliden*	ON-NH-N=	P-67.1.4.3.3
nitrozooksy*	ON-O-	P-67.1.4.3.1
nitrydofosforyl = fosforonitrydoil*	N≡P<	P-67.1.4.1.1.4
nitrylo* = azanotriyl (nie azanylidyn; nie azanyliden)	-N<	P-35.2.1; P-62.2.5.1
nonanoil* = 1-oksononyl	CH_3-[CH_2]$_7$-CO-	P-65.1.7.4.1
nonan-1-yl = nonyl*	CH_3-[CH_2]$_7$-CH_2-	P-29.3.2.2; P-29.3.2.1
nonan-1-ylidene = nonyliden*	CH_3-[CH_2]$_7$-CH=	P-29.3.2.2; P-29.3.2.1
nonanylidyn = nonylidyn*	CH_3-[CH_2]$_7$-C≡	P-29.3.2.2; P-29.3.2.1

nonyl* = nonan-1-yl	CH_3-$[CH_2]_7$-CH_2-	P-29.3.2.1; P-29.3.2.2
nonylidene* = nonan-1-ylidene	CH_3-$[CH_2]_7$-CH=	P-29.3.2.1; P-29.3.2.2
nonylidyn* = nonanylidyn	CH_3-$[CH_2]_7$-C≡	P-29.3.2.1; P-29.3.2.2

oksalo* [nie karboksykarbonyl; nie karboksyformyl; nie hydroksy(okso)acetyl]	HO-CO-CO-	P-65.1.7.2.1
oksoaldehydoil = oksoacetyl*	HOC-CO-	P-65.1.7.2.4
oksaloamino* = (karboksykarbonylo)amino	HO-CO-CO-NH-	P-65.1.7.2.4
oksalil* = etanodioil	-CO-CO-	P-65.1.7.2.1
oksalilobis(azanodiyl)* = etanodioilobis(azanodiyl)	-HN-CO-CO-NH-	P-66.1.1.4.5.2
oksalilobis(azanotriyl) = oksalilodinitrylo* = etanodioilodinitrylo = etanodioilobis(azanotriyl)	>N-CO-CO-N<	P-66.1.1.4.5.2
oksalilobis(azanyloyliden)* = etanodioilobis(azanyloylidene)	=N-CO-CO-N=	P-66.1.1.4.5.2
oksalilodinitrylo* = oksalilodioilobis(azanotriyl) = etanodioilodinitrylo = etanodioilobis(azanotriyl)	>N-CO-CO-N<	P-66.1.1.4.5.2
2-oksaloetyl: patrz 3-karboksy-3-oksopropyl*		

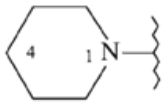
oksaloimidoil = etanodiimidoil* = 1,2-diiminoetano-1,2-diyl	-C(=NH)-C(=NH)-	P-65.1.7.2.2
oksalooksy* = (karboksykarbonylo)oksy	HO-CO-CO-O-	P-65.1.7.2.4
oksalosulfanyl* = (karboksykarbonylo)sulfanyl	HO-CO-CO-S-	P-65.1.7.2.4
oksamoil* = aminooksalil = amino(okso)acetyl (nie karbamoiloformyl)	H_2N-CO-CO-	P-66.1.1.4.1.2
oksamoiloamino* = amino(okso)acetamido (nie karbamoiloformamido)	H_2N-CO-CO-NH-	P-66.1.1.4.5.1
oksamoiloazanodiyl*	H_2N-CO-CO-N<	P-66.1.1.4.5.2
oksamoiloimino*	H_2N-CO-CO-N=	P-66.1.1.4.5.1
okso* (nie keto)	O=	P-64.5.1
oksoacetyl* = oksoaldehydoil	OCH-CO-	P-65.1.7.2.4
oksoarsanyl* (nie arsenozo)	OAs-	P-61.6
okso-λ^5-azanyl*	H_2NO-	P-62.5
(okso-λ^5-azanylidyno)metyl* (nie izofulminian)	ON≡C-	P-61.10; P-66.5.4.2
1-oksobutyl = butanoil* = butyryl	CH_3-CH_2-CH_2-CO-	P-65.1.7.3.1
1-oksodecyl = dekanoil*	CH_3-$[CH_2]_8$-CO-	P-65.1.7.4.1
1-oksododecyl = dodekanoil*	CH_3-$[CH_2]_{10}$-CO-	P-65.1.7.4.1
1-oksoetyl = acetyl* = etanoil	CH_3-CO-	P-65.1.7.2.1

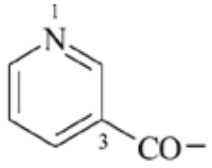
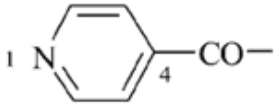
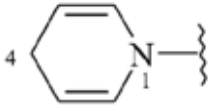
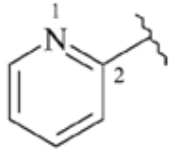
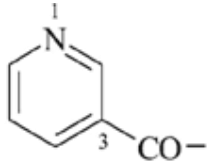
1-oksoheptyl = heptanoil*	CH_3-$[CH_2]_5$-CO-	P-65.1.7.4.1
1-oksoheksadecyl = heksadekanoil* = palmitoil	CH_3-$[CH_2]_{14}$-CO-	P-65.1.7.3.1
1-oksoheksyl = heksanoil*	CH_3-$[CH_2]_4$-CO-	P-65.1.7.4.1
oksolan-3-yl-4-ylidene*		P-29.3.3
oksometyl = formyl* = metanoil	HCO-	P-65.1.7.2.1; P-66.6.3
oksometyliden*	O=C=	P-65.2.1.8
1-oksononyl = nonanoil*	CH_3-$[CH_2]_7$-CO-	P-65.1.7.4.1
(9*Z*)-1-oksooktadek-9-en-1-yl = (9*Z*)-oktadek-9-enoyl* = oleoil	^{10}CH-$[CH_2]_7$-$^{18}CH_3$ ‖ ^{9}CH-$[^{8-2}CH_2]_7$-^{1}CO	P-65.1.7.3.1
oksooktadecyl = oktadekanoil* = stearoil	CH_3-$[CH_2]_{16}$-CO-	P-65.1.7.3.1
1-oksooktyl = oktanoil*	CH_3-$[CH_2]_6$-CO-	P-65.1.7.4.1
1-oksopentyl = pentanoil*	CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-CO-	P-65.1.7.4.1
okso(fenylo)metyl: patrz benzoil*		
oksofosfanyl* (nie fosforozo)	OP-	P-61.6; P-67.1.4.1.1.6
okso-λ^5-fosfanylidene*	HP(O)=	P-67.1.41.1.6
okso-λ^5-fosfanylidyne*	P(O)≡	P-67.1.4.1.1.6

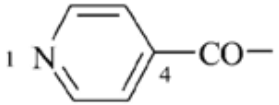
2-oksopropanoil* = 1,2-dioksopropyl (nie piruwoil)	CH_3-CO-CO-	P-65.1.1.2.3
1-oksoprop-2-en-1-yl = prop-2-enoil* = akryloil	CH_2=CH-CO-	P-65.1.7.3.1
2-oksopropyl*	CH_3-CO-CH_2-	P-64.5.1
2-oksopropyliden* (nie acetonyliden)	CH_3-CO-CH=	
oksostybanyl*	O=Sb-	P-67.1.4.1.1.6
1-okso-4-sulfanylidenobutano-1,4-diyl*	-CO-CH_2-CH_2-CS-	P-65.1.7.5
1-oksotetradecyl = tetradekanoil*	CH_3-$[CH_2]_{12}$-CO-	P-65.1.7.4.1
oksy*	-O-	P-63.2.2.1.1
oksydanyl = hydroksy*	HO-	P-63.1.4
oksydo*	$^{-}$O-	P-72.6.2
oksyl* = ylooksydanyl	$^{\cdot}$O-	P-71.5
oksylokarbonyl* = (ylooksydanylo)formyl	$^{\cdot}$O-CO-	P-71.5
oktadekanoil* = stearoil = 1-oksooktadecyl	CH_3-$[CH_2]_{16}$-CO-	P-65.1.7.3.1
oktadekan-1-yl = oktadecyl*	CH_3-$[CH_2]_{17}$-	P-29.3.3.2; P-29.3.2.1
(9*Z*)-oktadec-9-enoil* = oleoil = (9*Z*)-1-oksooktadec-9-en-1-yl	^{10}CH-$[CH_2]_7$-$^{18}CH_3$ ‖ ^{9}CH-$[^{8-2}CH_2]_7$-^{1}CO	P-65.1.7.3.1
oktadecyl* = oktadekan-1-yl	CH_3-$[CH_2]_{17}$-	P-29.3..2.1; P-29.3.2.2

oktanoil* = 1-oksooktyl	CH_3-$[CH_2]_6$-CO-	P-65.1.7.4.1
oktan-1-yl = oktyl*	CH_3-$[CH_2]_6$-CH_2-	P-29.3.2.2; P-29.3.2.1
oktan-1-ylidene = oktyliden*	CH_3-$[CH_2]_6$-CH=	P-29.3.2.2; P-29.3.2.1
oktanylidyn = oktylidyn*	CH_3-$[CH_2]_6$-C≡	P-29.3.2.2; P-29.3.2.1
oktyl* = oktan-1-yl	CH_3-$[CH_2]_6$-CH_2-	P-29.3.2.1; P-29.3.2.2
oktyliden* = oktan-1-ylidene	CH_3-$[CH_2]_6$-CH=	P-29.3.2.1; P-29.3.2.2
oktylidyn* = oktanylidyn	CH_3-$[CH_2]_6$-C≡	P-29.3.2.1; P-29.3.2.2

palmitoil = heksadekanoil* = 1-oksoheksadecyl	CH_3-$[CH_2]_{14}$-CO-	P-65.1.7.3.1
pentanodioil* = glutaryl = 1,5-dioksopentano-1,5-diyl	-CO-CH_2-CH_2-CH_2-CO-	P-65.1.7.3.1
pentanoil* = 1-oksopentyl	CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-CO-	P-65.1.7.4.1
pentan-1-yl = pentyl*	CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-	P-29.3.2.2; P-29.3.2.1
pentan-2-yl* = 1-metylobutyl	CH_3-CH_2-CH_2-CH(CH_3)-	P-29.3.2.2; P-29.4
pentan-1-ylidene = pentyliden*	CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-CH=	P-29.3.2.2; P-29.3.2.1
pentan-3-ylidene* = 1-etylopropyliden	(CH_3-CH_2)$_2$C=	P-29.3.2.2; P-29.4
pentanylidyne = pentylidyn*	CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-C≡	P-29.3.2.2; P-29.3.2.1
pent-2-enoil*	CH_3-CH_2-CH=CH-CO-	P-65.1.7.4.1
pentyl* = pentan-1-yl	CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-	P-29.3.2.1; P-29.3.2.2

tert-pentyl = 2-metylobutan-2-yl* = 1,1-dimetylopropyl	CH_3-CH_2-$C(CH_3)_2$-	P-29.3.2.1; P-29.6.1
pentyliden* = pentan-1-yliden	CH_3-CH_2-CH_2-CH_2CH=	P-29.3.2.1; P-29.3.2.2
pentylidyn* = pentan-1-ylidyn	CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-C≡	P-29.3.2.1; P-29.3.2.2
pentyloksy*	CH_3-$[CH_2]_3$-CH_2-O-	P-63.2.2.1.1
perbromyl*	O_3Br-	P-61.3.2.3
perchloryl*	O_3Cl-	P-61.3.2.3
perfluoryl*	O_3F-	P-61.3.2.3
perjodyl*	O_3I-	P-61.3.2.3
peroksy* (nie dioksy)	-OO-	P-63.3.1
peroksykarboksy: patrz karbonoperoksoil*		
peroksyfosforyl = fosforoperoksoil* = (hydroperoksy)fosforyl	HOO-P(O)<	P-67.1.4.1.1.4
1-piperydyl: patrz piperidin-1-yl*		
2-pirydyl: patrz pirydyn-2-yl*		
piperydyno: patrz piperydyn-1-yl*		
piperydyn-1-yl* = 1-piperydyl = piperydyno		P-29.6.2.3

piperydyn-4-yl* = 4-piperydyl (także izomery 1-, 2- i 3-)		P-29.6.2.3
piruwoil: patrz 2-oksopropanoil*	CH_3-CO-CO-	
pirydyno-3-karbonyl* = nikotynoil = 3-pirydylo karbonyl* = okso(pirydyn-3-ylo)metyl		P-65.1.7.3.1; P-65.1.7.4.2
pirydyno -4-karbonyl* =4- pirydylokarbonyl = izonikotynoil = okso(pirydyn -4-ylo)metyl		P-65.1.7.3.1; P-65.1.7.4.2
pirydyn-1(4*H*)-yl* także isomer 1(2*H*)-		P-29.3.4.1; P-29.6.2.3
pirydyn -2-yl* = 2-pirydyl (także izomery 3- i 4-)		P-29.3.4.1; P-29.6.2.3
3- pirydylokarbonyl = pirydyno -3-karbonyl* = okso(pirydyn-3-ylo)metyl		P-65.1.7.3.1; P-65.1.7.4.2

4- pirydylokarbonyl = pirydyno -4-karbonyl* = izonikotinoil = okso(pirydyn -4-ylo)metyl		P-65.1.7.3.1; P-65.1.7.4.2
plumbanylidyn = plumbylidyn*	HPb≡	P-29.3.1; P-68.2.2
plumbanyloyliden*	-PbH=	P-68.2.2
plumbyl* = plumbanyl	H_3Pb-	P-29.3.1; P-68.2.2
plumbylen: patrz plumbanodiyl*		
plumbyliden* = plumbanyliden	H_2Pb=	P-29.3.1; P-68.2.2
plumbylidyn* = plumbanylidyn	HPb≡	P-29.3.1; P-68.2.2
propanoamido* = propanoiloamino = propionoamido = propionyloamino	CH_3-CH_2-CO-NH-	P-66.1.1.4.3
propanodiimidoil* = malonoimidoil = 1,3-diiminopropano-1,3-diyl	-C(=HN)-CH_2-C(=NH)-	P-65.1.7.4.1
propanodioil* = malonyl = 1,3-dioksopropano-1.3-diyl	-CO-CH_2-CO-	P-65.1.7.3.1
propano-1,3-diyl* (nie trimetylen)	-CH_2-CH_2-CH_2-	P-29.3.2.2
propano-1,2-diyl* = 1-metyloetano-1,2-diyl (nie propylen)	-CH_2-CH(CH_3)-	P-29.3.2.2
propano-1,1,1-triyl	CH_3-CH_2-C<	P-29.3.2.2
propanotioil* = tiopropionyl = 1-sulfanylidenepropyl	CH_3-CH_2-CS-	P-65.1.7.4.1

propanoimidoil* = propionoimidoil = 1-iminopropyl	CH_3-CH_2-C(=NH)-	P-65.1.7.4.1; P-65.1.7.3.2
propanoil* = propionyl = 1-oksopropyl	CH_3-CH_2-CO-	P-65.1.7.3.1
propanoiloamino = propanoamido* = propionoamido = propionyloamino	CH_3-CH_2-CO-NH-	P-66.1.1.4.3
propanoiloksy* = propionyloksy	CH_3-CH_2-CO-O-	P-65.6.3.2.3
propan-1-yl = propyl*	CH_3-CH_2-CH_2-	P-29.3.2.2; P-29.3.2.1
propan-2-yl* = izopropyl = 1-metyloetyl	$(CH_3)_2$CH-	P-29.3.2.2; P-29.6.2.2; P-29.4.1
propan-1-yliden = propylidene*	CH_3-CH_2-C=	P-29.3.2.2; P-29.3.2.1
propan-2-ylidene* = 1-metyloetyliden = izopropyliden	$(CH_3)_2$C=	P-29.3.2.2; P-29.4.1; P-29.6.2.2
propanylidyn = propylidyn*	CH_3-CH_2-C≡	P-29.2
propan-1-ylidyn = propylidyn*	CH_3-CH_2-C≡	P-29.3.2.2; P-29.3.2.1
propan-2-yloksy* = izopropoksy = 1-metyloetoksy	$(CH_3)_2$CH-O-	P-63.2.2.2
propan-1-yl-1-ylidene*	CH_3-CH_2-$\overset{\vert}{C}$=	P-29.3.2.2
prop-2-enohydrazonoil* = akrylohydrazonoil = 1-hydrazynylidenoprop-2-en-1-yl	CH_2=CH-C(=NNH_2)-	P-65.1.7.3.2

prop-2-enoselenoil* = selenoakryloil = 1-selanylidenoprop-2-en-1-yl	CH_2=CH-C(Se)-	P-65.1.7.3.3
prop-2-enoil* = akryloil = 1-oksoprop-2-en-1-yl	CH_2=CH-CO-	P-65.1.7.3.1
prop-1-en-1-yl*	CH_3-CH=CH-	P-32.1.1
prop-1-en-2-yl* = 1-metyloeten-1-yl = izopropenyl	CH_2=C(CH_3)-	P-32.1.1; P-32.3
prop-2-en-1-yl* = allil	CH_2=CH-CH_2-	P-32.1.1; P-32.3
prop-2-en-1-yliden* = alliliden	CH_2=CH-CH=	P-32.1.1; P-32.3
prop-2-en-1-ylidyn* = allilidyn	CH_2=CH-C≡	P-32.1.1; P-32.3
propionoamido = propanoamido* = propionyloamino = propanoiloamino	CH_3-CH_2-CO-NH-	P-66.1.1.4.3
propionoimidoil = propanoimidoil* = 1-iminopropyl	CH_3CH_2-C(=NH)-	P-65.1.7.3.2
propionyl = propanoil* = 1-oksopropyl	CH_3-CH_2-CO-	P-65.1.7.3.1
propionyloamino = propanoamido* = propanoiloamino = propionoamido	CH_3-CH_2-CO-NH-	P-66.1.1.4.3
propionyloksy = propanoiloksy*	CH_3-CH_2-CO-O-	P-65.6.3.2.3
propoksy* (nie propyloksy)	CH_3-CH_2-CH_2-O-	P-63.2.2.2
propyl* = propan-1-yl	CH_3-CH_2-CH_2-	P-29.3.2.1; P-29.3.2.2
propyliden* = propan-1-yliden	CH_3-CH_2-C=	P-29.3.2.1; P-29.3.2.2

propylidyn* = propanylidyn	CH_3-CH_2-C≡	P-29.3.2.1; P-29.3.2.2
propyloksy: patrz propoksy*		

selaniumyl* = selenonio* = selenoniumyl	H_2Se^+-	P-73.6
selanodiyl* (nie seleno)	-Se-	P-63.2.5.1
selanyl* (nie hydroseleno)	HSe-	P-63.1.5
selanyliden* = selenokso	Se=	P-29.3.1; P-64.6.1
1-selanylidenoetyl = etanoselenoil* = selenoacetyl	CH_3-C(Se)-	P-65.1.7.2.3
selanylidenometyl = metanoselenoil* = selenoformyl	HC(Se)-	P-65.1.7.2.3; P-66.6.3
1-selanylidenoprop-2-en-1-yl = prop-2-enoselenoil* = selenoakryloil	CH_2=CH-C(Se)-	P-65.1.7.3.3
selanylofosfonoil*	HP(O)(SeH)-	P-67.1.4.1.1.5
seleneno: patrz hydroksyselanyl*		
selenino (niemodyfikowany)	HO-SeO-	P-65.3.2.1
seleninyl*	O=Se<	P-65.3.2.3
seleno: patrz selanodiyl*		

selenoacetyl = etanoselenoil* = 1-selanylidenoetyl	CH_3-C(Se)-	P-65.1.7.2.3
selenoakryloil = prop-2-eneselenoil* = 1-selanylidenoprop-2-en-1-yl	CH_2=CH-C(Se)-	P-65.1.7.3.3
selenocyjaniano* = karbononitrydoiloselanyl	NC-Se-	P-65.2.2
selenoformyl = metanoselenoil* = selenylidenometyl	HC(Se)-	P-65.1.7.2.3; P-66.6.3
selenonoimidotioil*	Se(=NH)(=S)<	P-65.3.2.3
selenonio = selaniumyl* = selenoniumyl	H_2Se^+-	P-73.6
selenoniumyl = selaniumyl* = selenonio	H_2Se^+-	P-73.6
selenono (niemodyfikowane)*	HO-SeO_2-	P-65.3.2.1
selenonohydrazonoil*	Se(O)(=N-NH_2)<	P-65.3.2.3
selenokso = selanyliden*	S=	P-64.6.1
semikarbazono = karbamoylhydrazinylidene*	H_2N-CO-NH-N=	P-68.3.1.2.5
silanodiyl* (nie sililen)	H_2Si<	P-29.3.1; P-68.2.2
silanodiylodi(etano-1,2-diyl)* = silanodiylodietylen	-CH_2-CH_2-SiH_2-CH_2-CH_2-	P-29.4.2
silanodiylodietylen: patrz silanodiylodi(etano-1,2-diyl)*		
silanodiyliden*	=Si=	P-68.2.2

silanotetrayl*	>Si<	P-68.2.2
silanotriyl*	-SiH<	P-68.2.2
silanyl = silyl*	H_3Si-	P-29.3.1; P-68.2.2
silanyliden: patrz silyliden*		
silanylidyn: patrz silylidyn*		
silanylyliden*	-SiH=	P-68.2.2
siloksy: patrz sililoksy*		
silil* = silanyl	H_3Si-	P-29.3.1; P-68.2.2
(sililoamino)silil* (nie disilazan-1-yl)	H_3Si-NH-SiH_2-	P-29.3.2.2
sililen: patrz silanodiyl*		
sililiden* = silanylidene	H_2Si=	P-29.3.1; P-68.2.2
sililidyne* = silanylidyne	HSi≡	P-29.3.1.; P-68.2.2
sililoksy* (nie siloksy)	H_3Si-O-	P-63.2.2.1.1
3-sililotetrasilan-1-yl*	$\overset{4}{S}iH_3$-$\overset{3}{S}iH(SiH_3)$-$\overset{2}{S}iH_2$-$\overset{1}{S}iH_2$-	P-29.4.1
stannanodiyl* (nie stannylen)	H_2Sn<	P-68.2.2
stannanodiyliden*	=Sn=	P-68.2.2
stannanotetrayl*	>Sn<	P-68.2.2
stannanotriyl*	-SnH<	P-68.2.2
stannanyl = stannyl*	H_3Sn-	P-29.3.1; P-68.2.2

stannanyliden = stannyliden*	$H_2Sn=$	P-29.3.1; P-68.2.2
stannanylidyne = stannylidyne*	$HSn\equiv$	P-29.3.1; P-68.2.2
stannanylyliden*	-SnH=	P-68.2.2
stannyliden* = stannanyliden	$H_2Sn=$	P-29.3.1; P-68.2.2
stannylidyne* = stannanylidyn	$HSn\equiv$	P-29.3..1; P-68.2.2
stearoil = oktadecanoil* = 1-oksooktadecyl	CH_3-$[CH_2]_{16}$-CO-	P-65.1.7.3.1
stybanodiyl* (nie stybinodiyl)	HSb<	P-68.3.2.3.2..2
stybanotriyl* (nie stybinotriyl)	-Sb<	P-68.3.2.3.2.2
stybaniumyl* = stybonio = styboniumyl	H_3Sb^+-	P-73.6
stybanyl* = stybino	H_2Sb-	P-29.3.1; P-68.3.2.3.2.2
λ^5-stybanyl* = styboranyl	H_4Sb-	P-68.3.2.3.2.2
stybanyliden*	HSb=	P-29.3.1; P-68.3.2.3.2.2
stybanylyliden*	-Sb=	P-68.3.2.3.2.2
stybinodiyl: patrz stybanodiyl*		
stybinotriyl: patrz stybanotriyl*		
stybinoimidoil* = imidostybinoil	$H_2Sb(=NH)$-	P-67.1.4.1.1.4
stybino = stybanyl*	H_2Sb-	P-29.3.1; P-68.3.2.3.2.2
stybinotioil* = dihydrostyborotioil	$H_2Sb(S)$-	P-67.1.4.1.1.4
stybinoil* = dihydrostyboryl	$H_2Sb(O)$	P-67.1.4.1.1.2

stybonato*	$(^{-}O)_2Sb(O)$-	P-72.6.1
stybonio = stybaniumyl* = styboniumyl	H_3Sb^{+}-	P-73.6
styboniumyl = stybaniumyl* = stybonio	H_3Sb^{+}-	P-73.6
stybono*	$(HO)_2Sb(O)$-	P-67.1.4.1.1.1
stybonoil* = hydrostyboryl	HSb(O)<	P-67.1.4.1.1.2
styboranyl = λ^5-stybanyl*	H_4Sb-	P-68.3.2.3.2.2
styborodiamidotioil*	$(H_2N)_2Sb(S)$-	P-67.1.4.1.1.4
styborohydrazonoil* = hydrazonostyboryl	-Sb(=NNH_2)<	P-67.1.4.1.1.4
styboronitrydoil*	N≡Sb<	P-67.1.4.1.1.4
styboryl* (nie antymonyl)	-Sb(O)<	P-67.1.4.1.1.4
styryl = 2-fenylotenyl* = 2-fenylowinyl	C_6H_5-CH=CH-	P-32.3
sukcynoimidoil = butanodiimidoil* = 1,4-diiminobutano-1,4-diyl	-C(=NH)-CH_2-CH_2-C(=NH)-	P-65.1.7.3.2
sukcynyl = butanodioil* = 1,4-dioksobutano-1,4-diyl	-CO-CH_2-CH_2-CO-	P-65.1.7.3.1
sulfamoil* = aminosulfonyl = sulfuroamidoil	H_2N-SO_2-	P-65.3.2.3; P-66.1.1.4.2
sulfamoiloksy* = sulfuramidoiloksy	H_2N-SO_2-O-	P-67.1.4.4.2
sulfanodiyl* (nie tio)	-S-	P-63.2.5.1
sulfanodiylobis(metylen)* (nie sulfanodiylodimetylen)	-CH_2-S-CH_2-	P-63.2.2.1.3

sulfanodiylodimetylen: patrz sulfanodiylobis(metylen)*		
sulfaniumyl* = sulfoniumyl = sulfonio	H_2S^+-	P-73.6
sulfanyl* (nie merkapto)	HS-	P-63.1.5
2-sulfanylo-1,2-bis(sulfanylideno)etyl* = 2-sulfanylo-2-sulfanylidenoetanetioil = tritiooksalo	HS-CS-CS-	P-65.1.7.2.4
sulfanyloboranyl*	HS-BH-	P-67.1.4.2
(*C*-sulfanylokarbonoimidoilo)amino* = [imino(sulfanylo)metylo]amino	HS-C(=NH)-NH-	P-66.1.6.1.3.3
sulfanylokarbonotioil = ditiokarboksy*	HS-CS-	P-65.2.1.6
[(sulfanylokarbonotioilo)sulfanylo]karbonotioil = [(ditiokarboksy)sulfanylo]karbonotioil* = [sulfanylo(tiokarbonylo)sulfanylo](tiokarbonyl) {nie [(ditiokarboksy)sulfanylo]tioformyl}	HS-CS-S-CS-	P-65.2.3.1.5
sulfanylkarbonyl* (nie merkaptokarbonyl)	HS-CO-	P-65.2.1.6
(sulfanylokarbonylo)oksy*	HS-CO-O-	P-65.2.1.6
sulfanylideno* = tiokso	S=	P-29.3.1; P-64.6.1
sulfanylidenoamino = tionitrozo* = tioksoamino	S=N-	P-67.1.4.3.2
1-sulfanylidenobutyl = butanotioil* = tiobutyryl	CH_3-CH_2-CH_2-CS-	P-65.1.7.4.1

1-sulfanylidenoetyl = etanotioil* = tioacetyl	CH_3-CS-	P-65.1.7.2.3
sulfanylidenometyl = metanotioil* = tioformyl	HCS-	P-65.1.7.2.3; P-66.6.3
sulfanylidenometyliden* = tioksometyliden	CS=	P-65.2.1.8
1-sulfanylidenopropyl = propanotioil* = tiopropionyl	CH_3-CH_2-CS-	P-65.1.7.4.1
sulfanyloksy* = *SO*-tiohydroperoksy (nie merkaptooksy)	HS-O-	P-63.4.2.2
[(sulfanyloksy)karbonylo]oksy* = [(*SO*-tiohydroperoksy)karbonylo]oksy	(HSO)-CO-O-	P-65.2.1.7
(sulfanyloksy)fosforyl* = (*SO*-tiohydroperoksy)fosforyl	(HSO)P(O)<	P-67.1.4.1.1.5
sulfanylofosfonotioil* = sulfanylo(tiofosfonoil)	(HS)HP(S)-	P-67.1.4.1.1.5
2-sulfanylo-1,2-sulfanylidenoetanotioil = 2-sulfanylo-1,2-bis(sulfanylideno)etyl* = tritiooksalo	HS-CS-CS-	P-66.1.7.2.4
(sulfanylosulfinylo)oksy*	HS-SO-O-	P-65.3.2.3
sulfanylosulfonoditioil = tritiosulfo*	HS-S$(S)_2$-	P-65.3.2.1

[sulfanylo(tiokarbonylo)sulfanylo](tiokarbonyl) = [(ditiokarboksy)sulfanylo]karbonotioil* = [(sulfanylokarbonotioilo)sulfanylo]karbonotioil {nie [(ditiokarboksy)sulfanylo]tioformyl}	HS-CS-S-CS-	P-65.2.3.1.5
sulfanylo(tiofosfonoilo) = sulfanylofosfonotioil*	HS-HP(S)-	P-67.1.4.1.1.5
sulfeno: patrz hydroksysulfanyl*		
sulfido*	$^{-}$S-	P-72.6.2
sulfinoamoil: patrz aminosulfinyl*		
sulfinoamoiloksy: patrz (aminosulfinylo)oksy*		
sulfinoimidoil*	-S(=NH)-	P-65.3.2.3
sulfino (niemodyfikowane*)	HO-SO-	P-65.3.2.1
sulfinotioil*	-S(S)-	P-65.3.2.3
sulfinyl* = tionyl	-SO-	P-65.3.2.3
sulfinylobis(oksy)* (nie sulfinylodioksy)	-O-SO-O-	P-65.3.2.3
sulfinylodioksy: patrz sulfinylobis(oksy)*		
sulfo* (niemodyfikowane)	HO-SO_2-	P-65.3.2.1
sulfoniano*	$^{-}$O-SO_2-	P-72.6.1
sulfonoimidoil* = sulfuroimidoil	-S(O)(=NH)-	P-65.3.2.3; P-67.1.4.4.1
sulfonio = sulfaniumyl* = sulfoniumyl	H_2S^{+}-	P-73.6

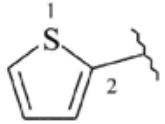
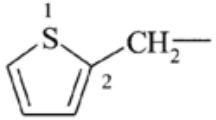
sulfoniumyl: patrz sulfaniumyl*		
sulfonodihydrazonoil* = sulfurodihydrazonoil	-S(=N-NH_2)$_2$-	P-67.1.4.4.1
sulfonodiimidoil* sulfurodiimidoil	-S(=NH)$_2$-	P-67.1.4.4.1
sulfonoditioil* = sulfuroditioil	-S(S)$_2$-	P-65.3.2.3; P-67.1.4.4.1
sulfonohydrazonoil* = sulfurohydrazonoil	-S(O)(=NNH_2)-	P-65.3.2.3; P-67.1.4.4.1
sulfonotioil* = sulfurotioil	-S(O)(S)-	P-65.3.2.3; P-67.1.4.4.1
sulfonyl* = sulfuryl	-SO_2-	P-65.3.2.3; P-67.1.4.4.1
sulfonylobis(metylen)* (nie sulfonylodimetylen)	-CH_2-SO_2-CH_2-	P-65.3.2.3
sulfonylobis(oksy)* (nie sulfonylodioksy)	-O-SO_2-O-	P-65.3.2.3
sulfonylobis(sulfanodiyl)* (nie sulfonylodisulfanodiyl)	-S-SO_2-S-	P-65.3.2.3
sulfonylodimetylen: patrz sulfonylobis(metylen)*		
sulfonylodioksy: patrz sulfonylobis(oksy)*		
sulfonylodisulfanodiyl: patrz sulfonylobis(sulfanodiyl)*		
sulfooksy*	HO-SO_2-O-	P-65.3.2.3; P-67.1.4.4.2
sulfuroamidoil = sulfamoil* = aminosulfonyl	H_2N-SO_2-	P-65.3.2.3
sulfuroamidoiloksy = sulfamoiloksy*	H_2N-SO_2-O-	P-67.1.4.4.2

sulfuroimidoil = sulfonoimidoil*	-S(O)(=NH)-	P-65.3.2.3; P-67.1.4.4.1
sulfuro(izotiocyjanianido)tioil = izotiocyjanianosulfonotioil*	(SCN)S(O)(S)-	P-67.1.4.4.1
sulfuroizotiocyjanianidoil = izotiocyanianosulfonyl*	(CSN)SO_2-	P-67.1.4.4.1
sulfurochlorydoil = chlorosulfonyl*	Cl-SO_2-	P-67.1.4.4.1
sulfurochlorydoiloksy = (chlorosulfonyl)oksy*	Cl-SO_2-O-	P-67.1.4.4.2
sulfurocyjanianidoil = cyjanosulfonyl*	NC-SO_2-	P-67.1.4.4.1
sulfurodihydrazonoil = sulfonodihydrazonoil*	-S(=NNH_2)$_2$-	P-67.1.4.4.1
sulfurodiimidoil* = sulfonodiimidoil	-(=NH)$_2$-	P-67.1.4.4.1
sulfuroditioil: patrz sulfonoditioil*		
sulfurohydrazonoil: patrz sulfonohydrazonoil*		
sulfuro(izotiocyjanianido)tioil = izotiocyjanianosulfonotioil*	SCN-S(O)(S)-	P-67.1.4.4.1
sulfurotioil = sulfonotioil*	-S(O)(S)-	P-65.3.2.3; P-67.1.4.4.1
sulfuryl = sulfonyl*	-SO_2-	P-65.3.2.3; P-67.1.4.4.1

talanyl*	H_2Tl-	P-29.3.1; P-68.1.2
tellanodiyl* (nie telluro)	-Te-	P-63.2.5.1
tellanyl* (nie hydrotelluro)	HTe-	P-63.1.5

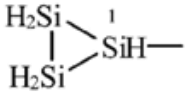
tellanyliden* = tellurokso	Te=	P-29.3.1; P-64.6.1; P-66.6.3
tellanylidenometyl = metanotelluroil* = telluroformyl	HC(Te)-	P-65.1.7.2.3; P-66.6.3
tellureno: patrz hydroksytellanyl*		
telluro: patrz tellanodiyl*		
telluryno* (niemodyfikowany)	HO-TeO-	P-65.3.2.1
tellurynyl*	-TeO-	P-65.3.2.3
tellurocyjaniano* = karbononitrydoilotellanyl	NC-Te-	P-65.2.2
telluroformyl = metanotelluroil* = tellanylidenometyl	HC(Te)-	P-65.1.7.2.3; P-66.6.3
tellurokso = tellanyliden*	Te=	P-64.6.1; P-29.3.1
tellurono* (niemodyfikowany)	$HO\text{-}TeO_2\text{-}$	P-65.3.2.1
telluronyl*	$\text{-}TeO_2\text{-}$	P-65.3.2.3
telluryno* (niemodyfikowany)	HO-TeO-	P-65.3.2.1
tellurynyl*	-TeO-	P-65.3.2.3
tereftalimidoil = benzeno-1,4-dikarboksyimidoil* = 1,4-fenylenobis(iminometylen)		P-65.1.7.3.2

tereftaloil = benzeno-1,4-dikarbonyl* = 1,4-fenylenodikarbonyl = 1,4-fenylenobis(oksometylen)		P-65.1.7.3.1
tetraazanyl*	H_2N-NH-NH-NH-	P-68.3.1.4.1
tetradekanoil* = 1-oksotetradecyl	CH_3-$[CH_2]_{12}$-CO-	P-65.1.7.4.1
tetrametylen: patrz butano-1,4-diyl*		
tetrasulfanodiyl* = tetratio	-S-S-S-S-	P-68.4.1.2
tio: patrz sulfanodiyl* (nie sulfenyl)		
tioacetamido = etanotioamido* = etanotioiloamino	CH_3-CS-NH-	P-66.1.4.4
tioacetyl = etanotioil* = 1-sulfanylidenoetyl	CH_3-CS-	P-65.1.7.2.3
tioazonoil = azonotioil*	HNS<	P-67.1.4.1.1.4
tiobenzamido = benzenokarbotioamido* = benzenokarbotioiloamino	C_6H_5-CS-NH-	P-66.1.4.4
tiobenzoil = benzenokarbotioil* = fenylo(sulfanylideno)metyl	C_6H_5-CS-	P-65.1.7.2.3
tioborono* = hydroksylo(sulfanylo)boranyl	(HO)(HS)B-	P-68.1.4.2
tiobutyryl = butanotioil* = 1-sulfanylidenobutyl	CH_3-CH_2-CH_2-CS-	P-65.1.7.4.1
tiochlorozyl*	Cl(S)-	P-67.1.4.5

tiocyjaniano* = karbononitrydoilosulfanyl = karbononitrydoilotio	NC-S-	P-65.2.2
tiocyjanianosulfanyl: patrz cyjanodisulfanyl*		
tiodimetylen: patrz sulfanodiylobis(metylen)*		
tiofen-2-yl* = 2-tienyl (również izomer 3-)		P-29.6.2.3
tiofen-2-ylometyl* = tenyl (tylko izomer 2-)		P-29.6.3
tioformamido: patrz metanotioamido*		
tioformyl = metanotioil* = sulfanylidenometyl	HCS-	P-65.1.7.2.3; P-66.6.3
tiofosfinoil = fosfinotioil*	H_2PS-	P-67.1.4.1.1.4
tiofosfinoil = fosfinotioil*	H_2PS-	P-67.1.4.1.1.4
tiofosfono (nieokreślone*)	$H_2\{O_2S\}P$-	P-67.1.4.1.1.1
tiofosforyl = fosforotioil*	-PS<	P-67.1.4.1.1.4
OS-tiohydroperoksy = hydroksysulfanyl*	HOS-	P-63.4.2.2
tiokarbamoil: patrz karbamotioil*		
tiokarboksy (niesprecyzowany*)	H{S/O}C-	P-65.2.1.6
tiokarbonyl = karbonotioil*	-CS-	P-65.2.1.5
tiokarbamoil: patrz karbamotioil*		

tiokarboksy (niesprecyzowany*)	H{S/O}C-	P-65.2.1.6
tiokarbonyl = karbonotioil*	-CS-	P-65.2.1.5
tiokso =sulfanyliden*	S=	P-64.6.1
tioksoamino = tionitrozo* = sulfanylidenoamino	S=N-	P-67.1.4.3.2
tioksometyliden = sulfanylidenometyliden*	S=C=	P-65.2.1.8
tionitrozo* = sulfanylidenoamino = tioksoamino	S=N-	P-67.1.4.3.2
tionyl = sulfinyl*	-SO-	P-65.3.2.3
(tioperoksy)fosforyl = fosforo(tioperoksyl)*	(HSO)P(O)< lub (HOS)P(O)<	P-67.1.4.1.1.4
tiopropionyl = propanotioil* = 1-sulfanylidenopropyl	CH_3-CH_2-CS-	P-65.1.7.4.1
tiosulfeno: patrz disulfanyl*		
tiosulfino (nieokreślone*)	H{O/S}S	P-65.3.2.1
tiosulfo* (nieokreślone)	HO_2S_2-	P-65.3.2.1
tiosulfeno: patrz disulfanyl*		
tiosulfino (nieokreślone*)	H{O/S}S	P-65.3.2.1
tiosulfo* (nieokreślone)	HO_2S_2-	P-65.3.2.1
triaz-1-ene-1,3-diyl* (nie diazoamino)	-N=N-N-	P-68.3.1.4.2

triaz-2-en-1-io: patrz triaz-2-en-1-ium-1-yl*	$\overset{3}{HN}=\overset{2}{N}-\overset{1}{\overset{+}{N}H_2}-$	P-73.6
triaz-2-en-1-ium-1-yl* = triaz-2-en-1-io	$\overset{3}{HN}=\overset{2}{N}-\overset{1}{\overset{+}{N}H_2}-$	P-73.6
triaz-2-en-1-yl* (nie 2-triazeno)	HN=N-NH-	P-32.1.1;P-68.3.1.4.1
triazan-1-yl* (nie triazano)	H_2N-NH-NH-	P-29.3.2.2; P-68.3.1.4.1
triazano: patrz triazan-1-yl*		
triboran(5)-1-yl*	H_2B-BH-BH-	P-68.1.2
tricyklo[3.3.1.$1^{3,7}$]dekan-2-yl = adamantan-2-yl* = 2-adamantyl (także isomer 1-)	$C_{10}H_{15}$-	P-29.6.2.3
trifenylometyl* = trytyl (niepodstawiony*)	$(C_6H_5)_3C$-	P-29.6.2.2
trihydroksysilil*	$(HO)_3Si$-	P-67.1.4.2
trimetoksysilil*	$(CH_3O)_3Si$-	P-67.1.4.2
trimetylen: patrz propano-1,3-diyl*		
trioksydanodiyl*	-O-O-O-	P-68.4.1.2
trioksydanyl* = hydrotrioksy	HO-O-O-	P-68.4.1.3
triselanodiyl*	-SeSeSe-	P-68.4.1.2
triselanyl*	HSeSeSe-	P-68.4.1.2
trisilan-2-yl*	$(SiH_3)_2SiH$-	P-29.3.2.2

trisilazan-3-yl: patrz bis(sililoamino)silil*		
trisiliranyl* = cyklotrisilan-1-yl		P-68.4.1.2
trisulfanodiyl* = tritio	-SSS-	P-68.4.1.2
tritellanodiyl*	-TeTeTe-	P-68.4.1.2
tritellanyl*	HTeTeTe-	P-68.4.1.3
tritio: patrz trisulfanodiyl*		
tritiofosfono*	$(HS)_2P(S)$-	P-67.1.4.1.1.1
tritiooksalo = 2-sulfanylo-2-sulfanylidenoetanotioil* = 2-sulfanylo-1,2-bis(sulfanylideno)etyl	HS-CS-CS-	P-65.1.7.3.3
tritiosulfo* = sulfanylosulfonoditioil	$HS\text{-}S(S)_2$-	P-65.3.2.1
trytyl (niepodstawiony*) = trifenylometyl*	$(C_6H_5)_3C$-	P-29.6.2.2

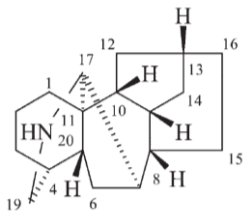
undecyl* = undekan-1-yl	$CH_3\text{-}[CH_2]_9\text{-}CH_2$-	P-29.3.2.1; P-29.3.2.2
undekan-1-yl = undecyl*	$CH_3\text{-}[CH_2]_9\text{-}CH_2$-	P-29.3.2.2; P-29.3.2.1
ureido: patrz karbamoiloamino*		
ureilen: patrz karbonylobis(azanodiyl)*		

winyl: patrz etenyl*	CH_2=CH-	P-32.3
winylen: patrz eteno-1,2-diyl*		
winylidene = etenylidene*	CH_2=C=	P-32.3

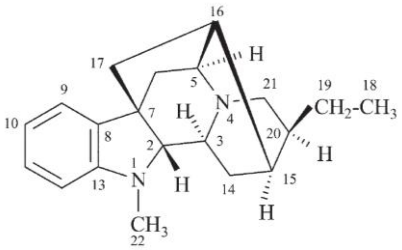
yloamino* = yloazanyl	$HN^{\bullet}$-	P-71.5
yloazanyl: patrz yloamino		
yloformyl*	O=$C^{\bullet}$	P-71.5
ylohydroksy: patrz oksyl*		
ylometyl*	$H_2C^{\bullet}$	P-71.5
ylooksydanyl = oksyl* (nie ylohydroksy)	$^{\bullet}$O-	P-71.5
(ylooksydanylo)formyl = oksylokarbonyl*	$^{\bullet}$O-CO-	P-71.5

Załącznik 3. Struktury alkaloidów, steroidów, terpenoidów i podobnych związków wymienionych w Tabeli 10.1, P-101.2.7 i Rozdziale 10

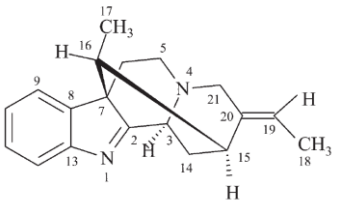
Alkaloidy



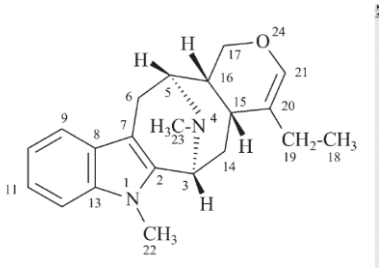
akonitan



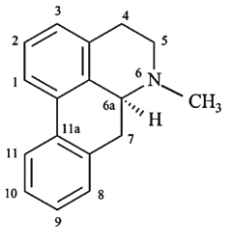
ajmalan



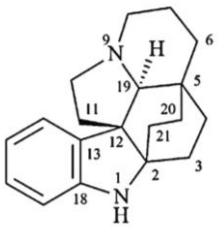
akuamilan**



alstofilan**

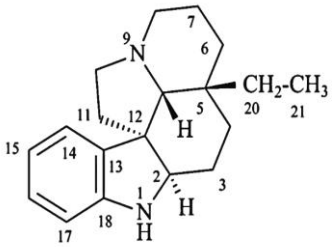


aporfina**

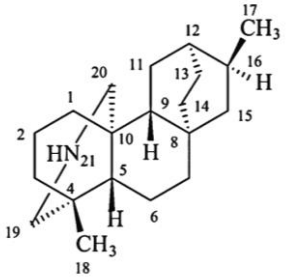


aspidofraktynina**

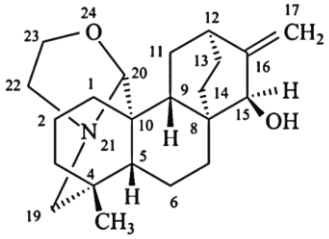
**Te struktury w CAS nazywa się systematycznie.



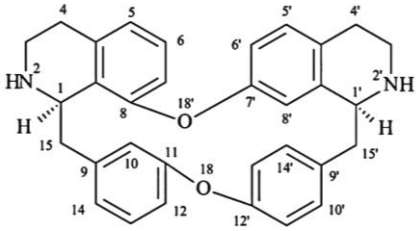
aspidospermidyna



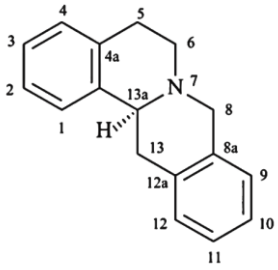
atydan**;††



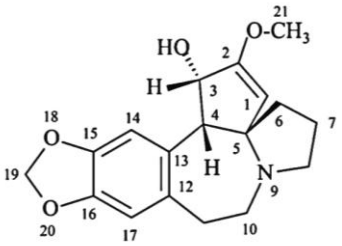
atyzyna**



berbaman**



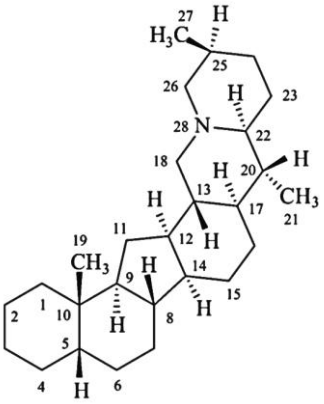
berbina**



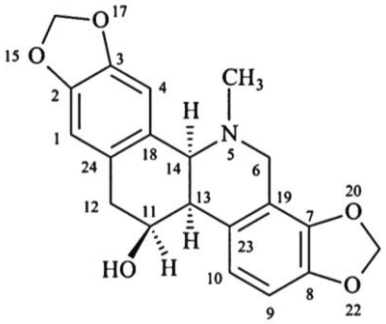
cefalotaksyna

** Te struktury w CAS nazywa się systematycznie.

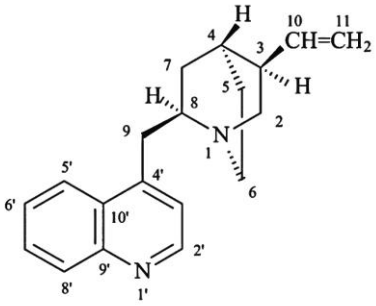
††Ta struktura jest poprawioną strukturą zamieszczoną w Revised Section F: Natural Products and Related Compounds (IUPAC: Recommendations 1999), *Pure and Appl. Chem.*, **71**, 587 – 643 (1999), w której brak było grupy 4β-metylowej.



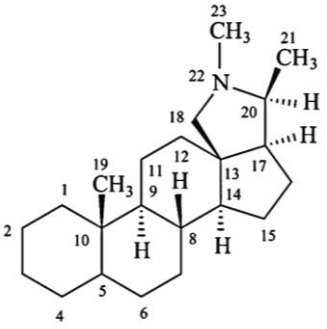
kewan



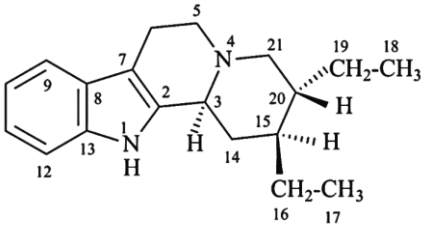
chelidonina**



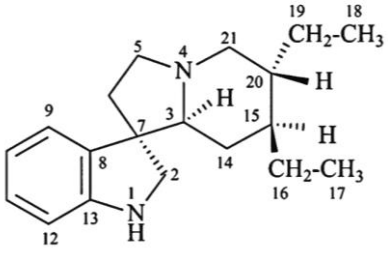
cynchonan**



konanina

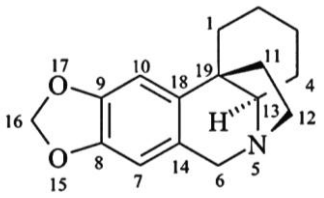


korynan**

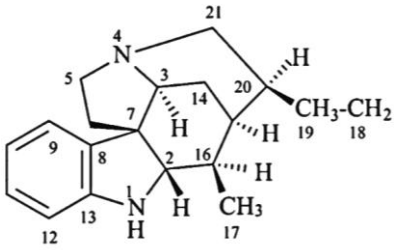


korynoksan**

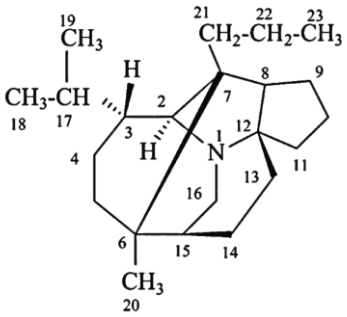
** Te struktury w CAS nazywa się systematycznie.



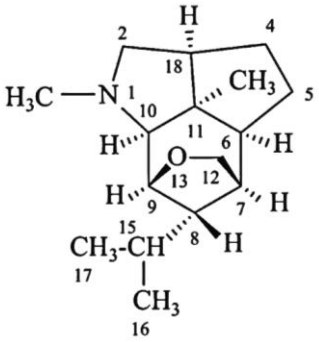
krynan**



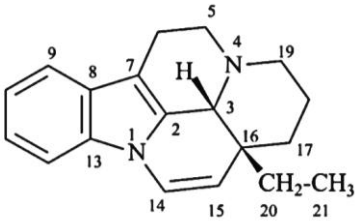
kuran



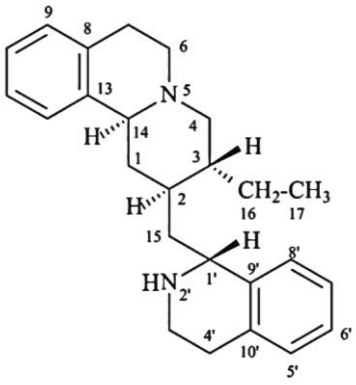
dafnan**



dendroban**

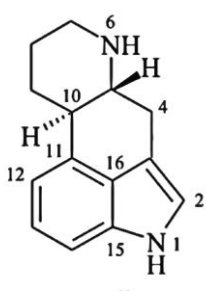


eburnamenina

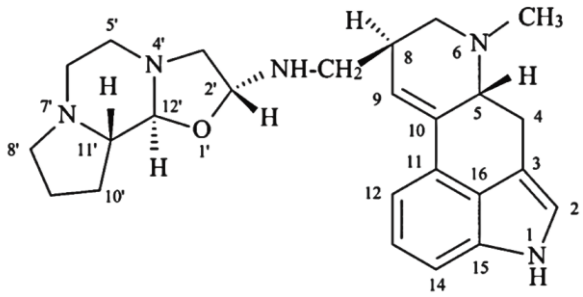


emetan

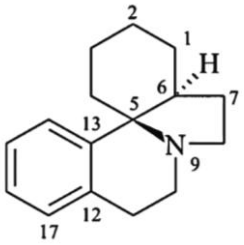
** Te struktury w CAS nazywa się systematycznie.



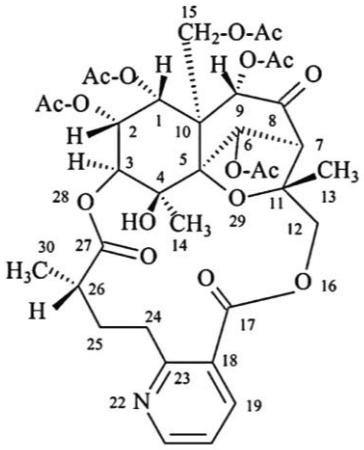
ergolina



ergotaman

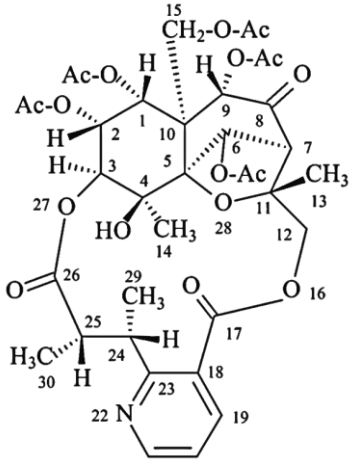


erytrynan

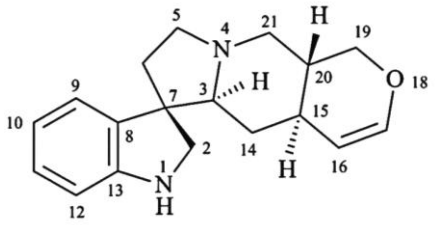


ewonimina**

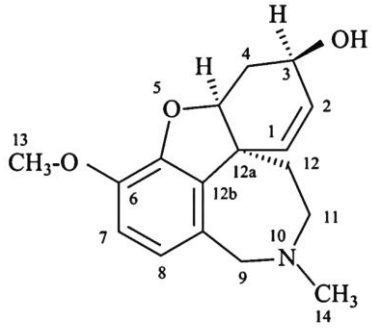
** Te struktury w CAS nazywa się systematycznie.



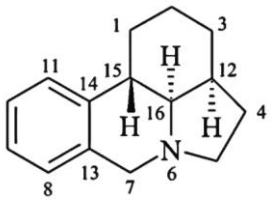
ewonina**



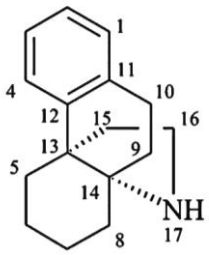
formozanan**



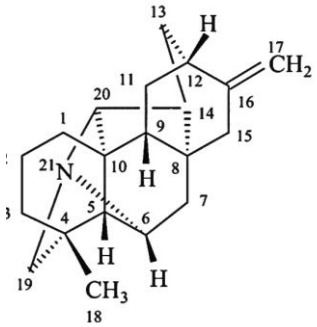
galantamina**



galantan**

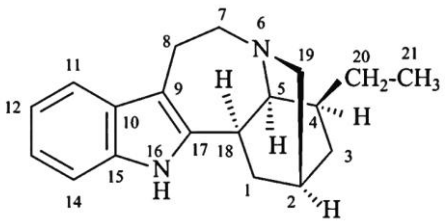


hasubanan

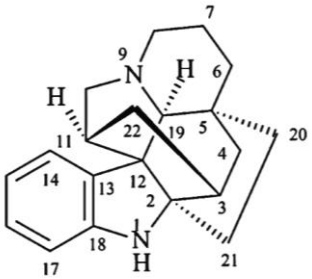


hetyzan

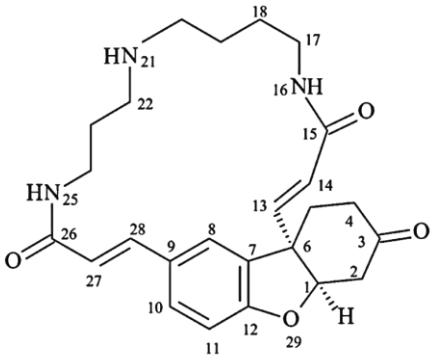
******Te struktury w CAS nazywa się systematycznie.



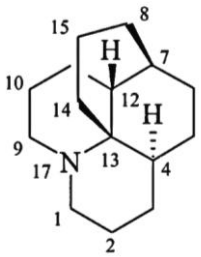
ibogamina



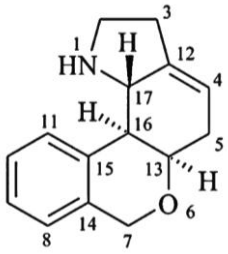
kopsan**



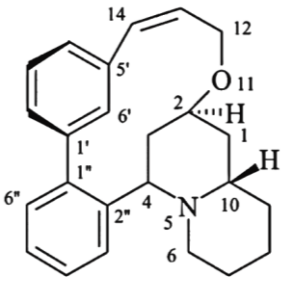
lunaryna**



likopodan**

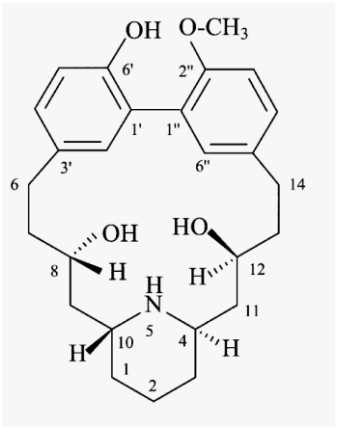


likorenan**

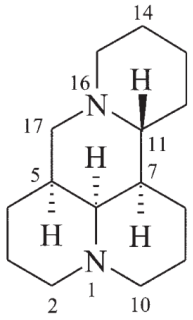


litran**

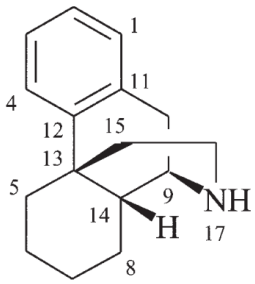
******Te struktury w CAS nazywa się systematycznie.



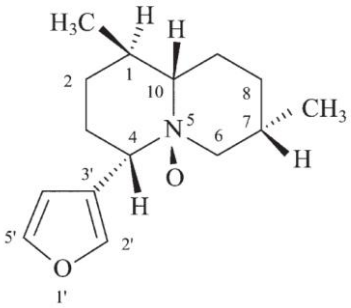
litranidyna**



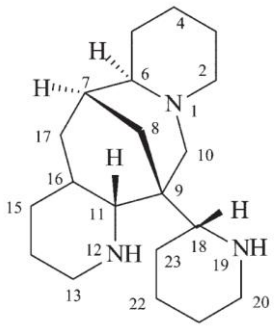
matrydyna**



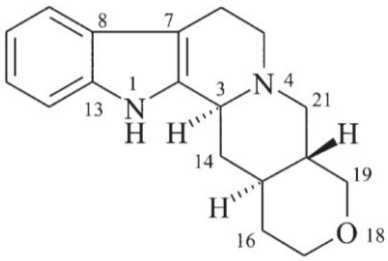
morfinan



nufarydyna**

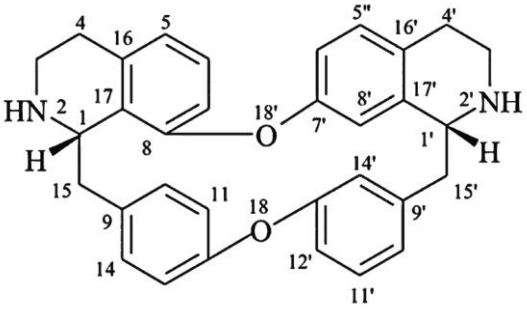


ormosanina

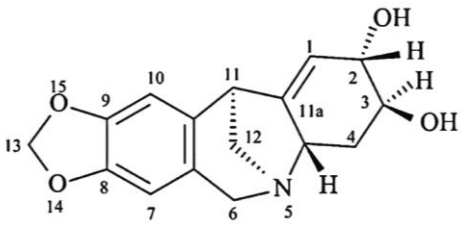


18-oksajohimban

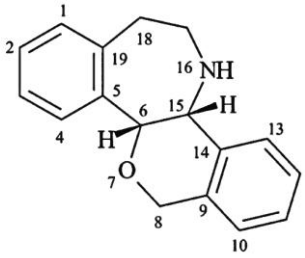
** Te struktury w CAS nazywa się systematycznie.



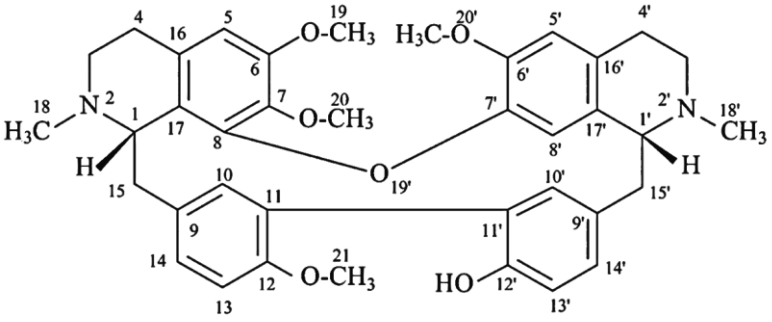
oksyakantan**



pankracyna**

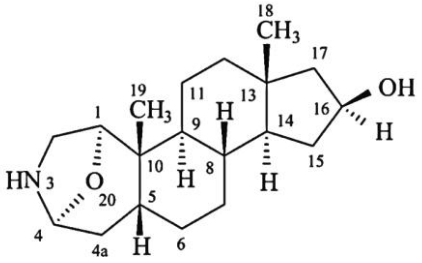


readan**

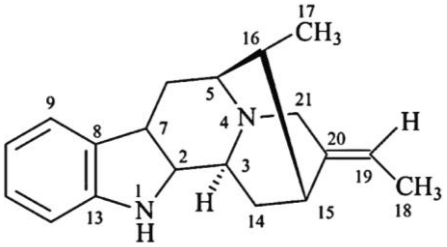


rodiazyna**

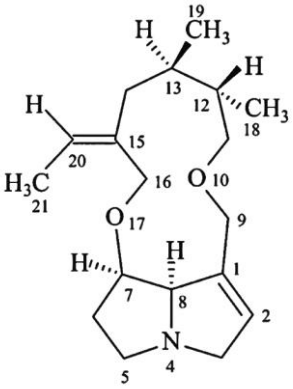
** Te struktury w CAS nazywa się systematycznie.



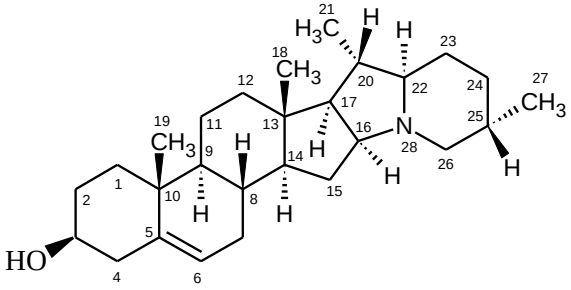
samandaryna**



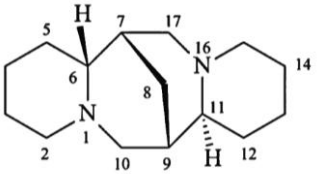
sarpagan



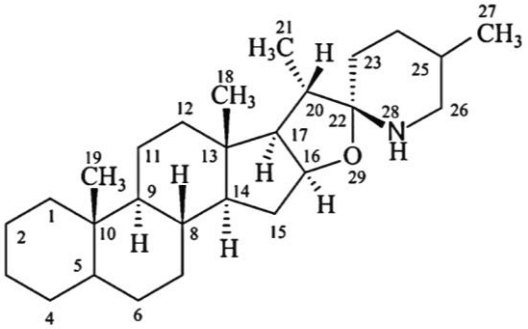
senecjonan**



solanidyna

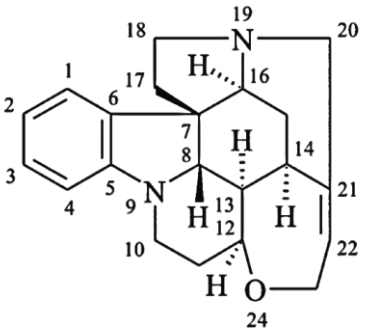


sparteina**

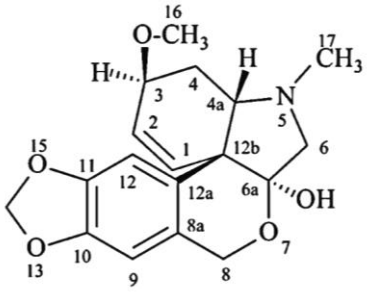


spirosolan**

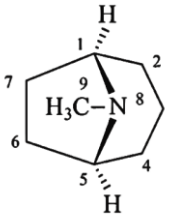
** Te struktury w CAS nazywa się systematycznie.



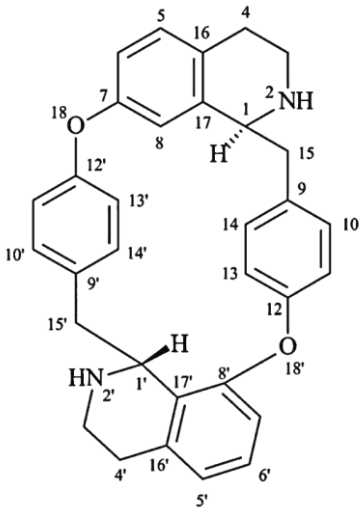
strychnidyna



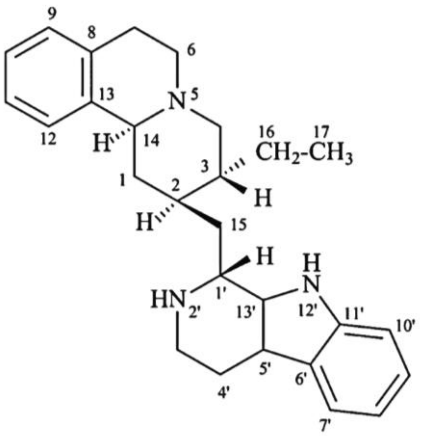
tazetyna**



1α*H*,5α*H*-tropan**

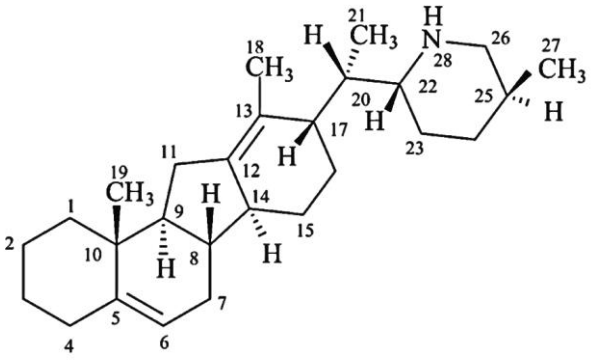


tubokuraran**

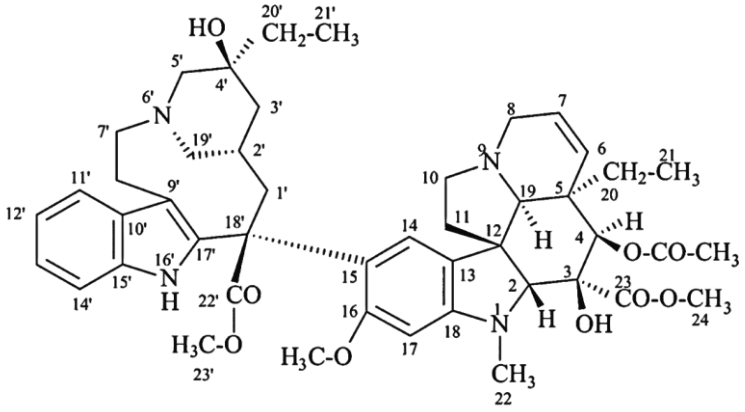


tubulozan**

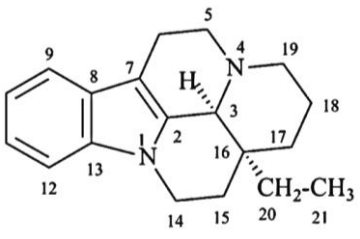
** Te struktury w CAS nazywa się systematycznie.



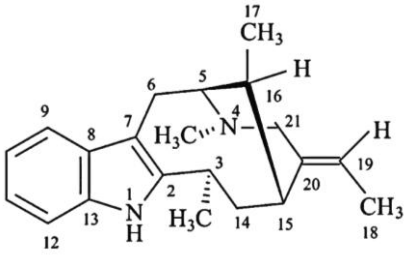
weratraman



winkaleukoblastyna

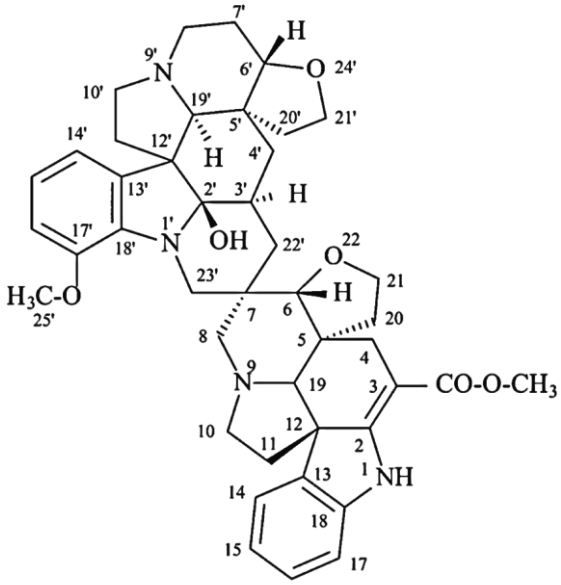


winkan**

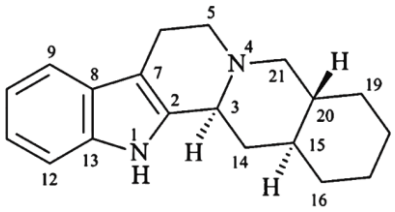


wobazan

** Te struktury w CAS nazywa się systematycznie.

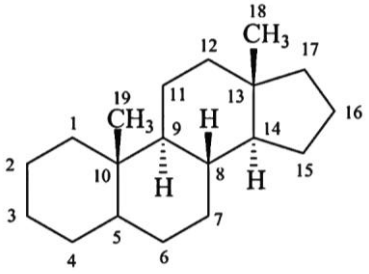


wobtuzyna **

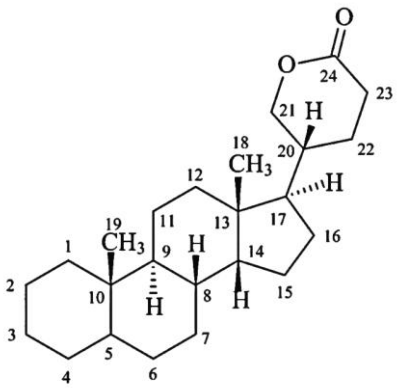


johimban

2. Steroidy

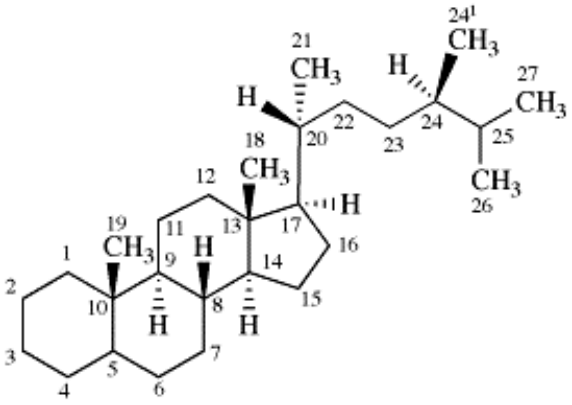


androstan

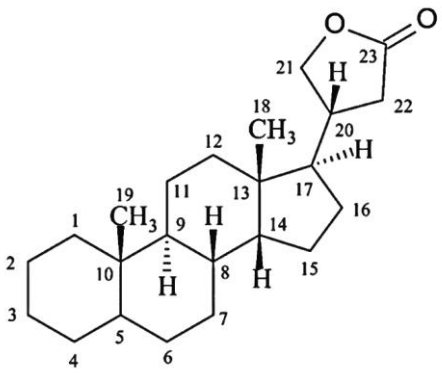


bufanolid

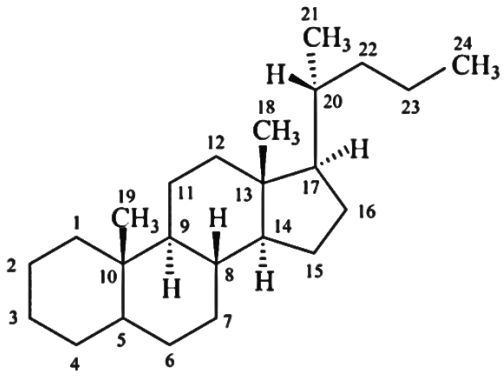
** Te struktury w CAS nazywa się systematycznie.



kampestan††

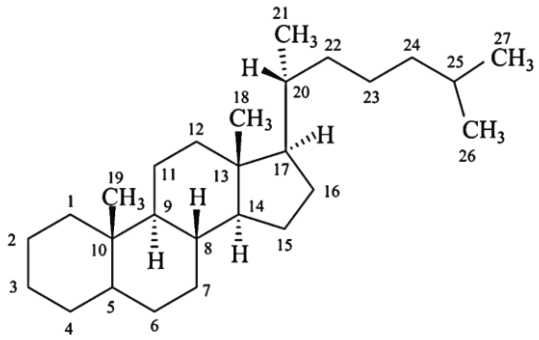


kardanolid**

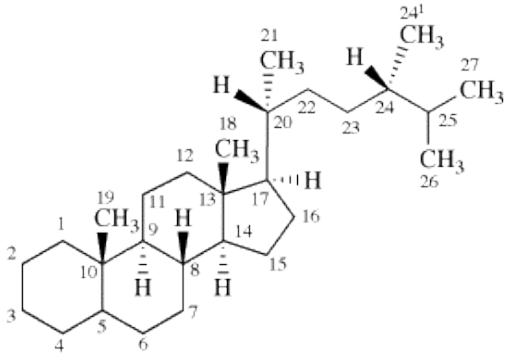


cholan

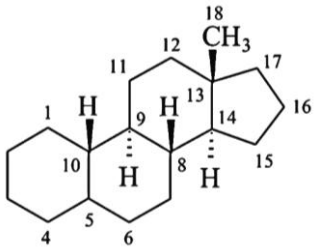
††Tę macierzystą strukturę w CAS nazywa się jako stereoizomer ergostanu, w którym lokant 24^1 jest 28.



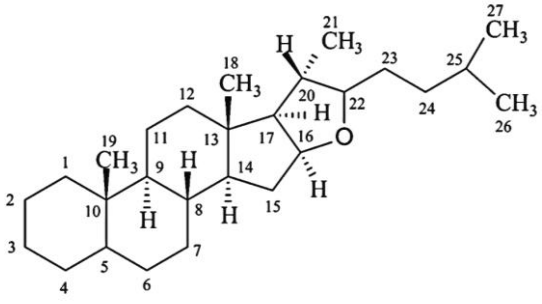
cholestan



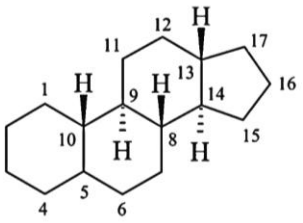
ergostan



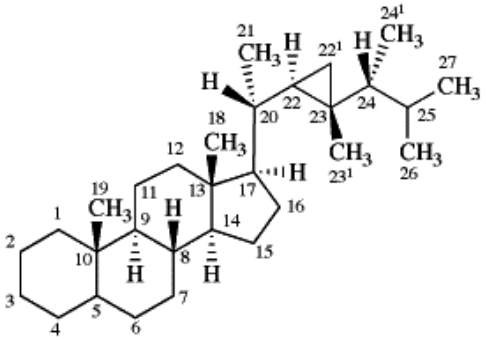
estran



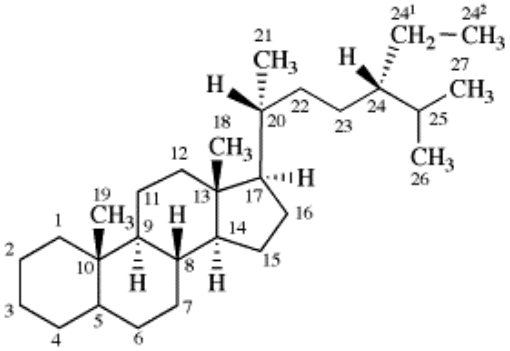
furostan



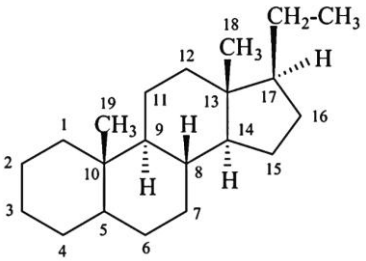
gonan



gorgostan*

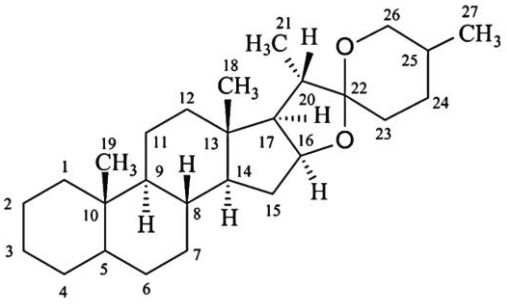


poryferastan††

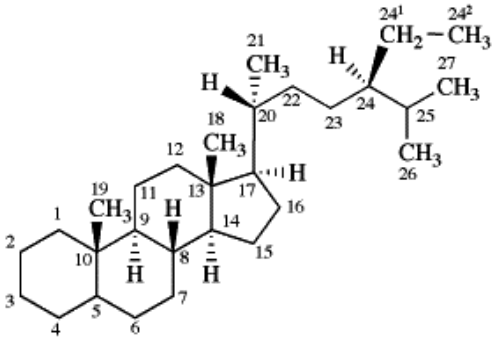


pregnan

*W CAS lokanty 22^1, 23^1 i 24^1 są, odpowiednio 34, 33, i 28.
††Tę macierzystą strukturę w CAS nazywa się jako stereoizomer stigmastanu, w którym lokanty 24^1 i 24^2 są odpowiednio 28 i 29.

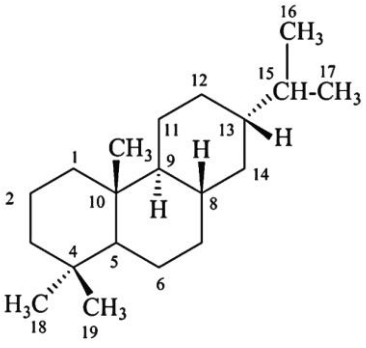


spirostan

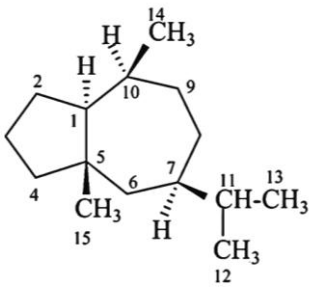


stigmastan

3. Terpenoidy

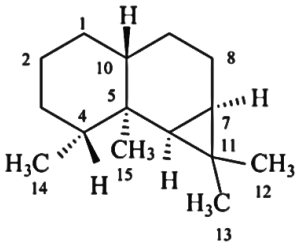


abietan**

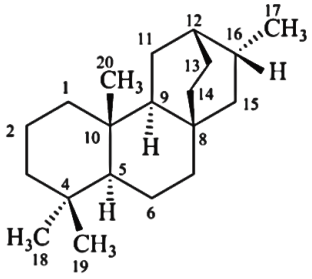


ambrozan**

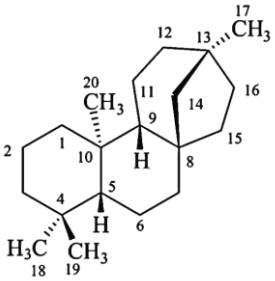
** Te naturalne struktury w CAS nazywa się systematycznie.



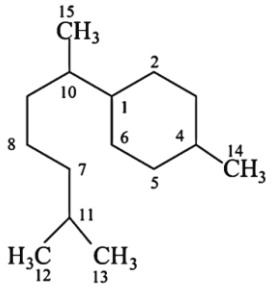
arystolan



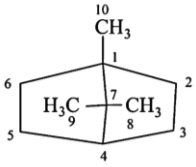
atyzan



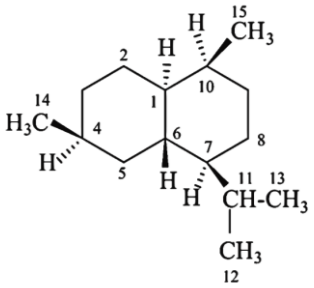
bejerans**



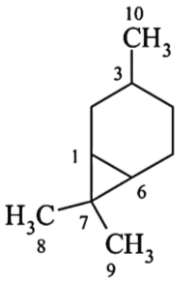
bisabolan**



bornan**

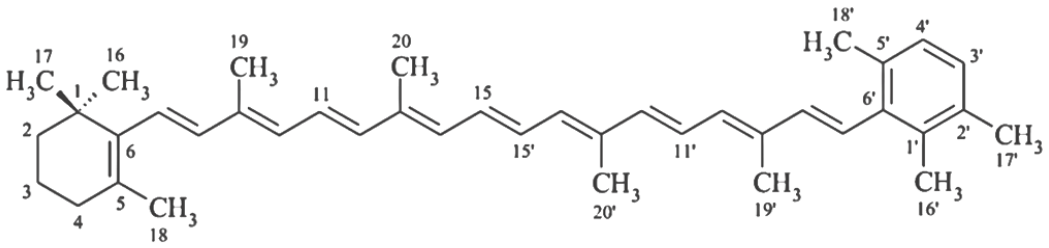


kadynan**

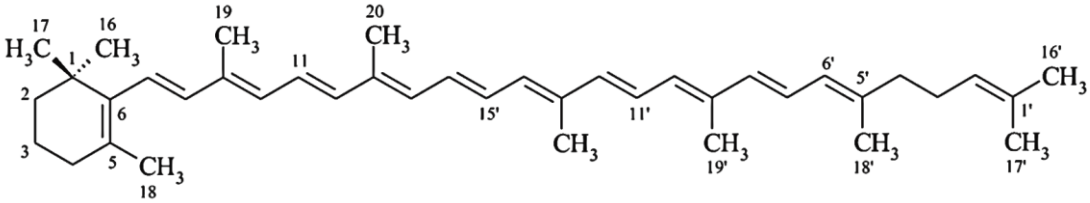


karan**

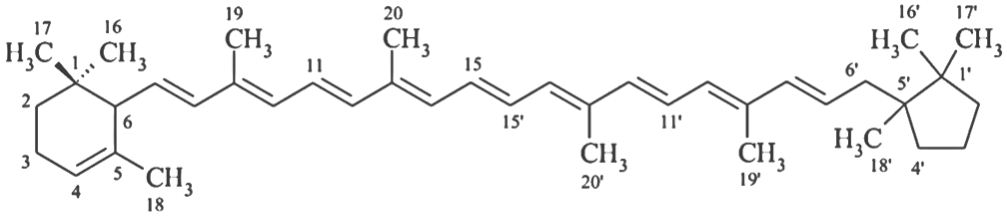
** Te struktury w CAS nazywa się systematycznie.



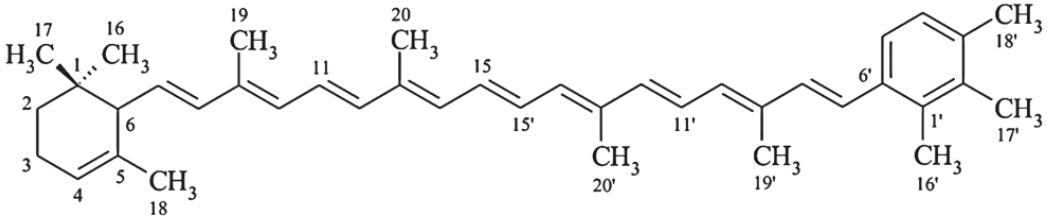
β,ϕ-karoten



β,ψ-karoten

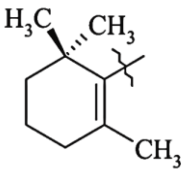


ε,κ-karoten

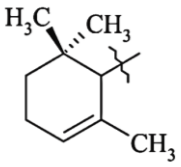


ε,χ-karoten

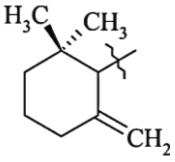
Uwaga: Możliwych jest 28 macierzystych struktur karotenu. Cztery z nich pokazano powyżej. 28 struktur powstaje w wyniku wszystkich permutacji siedmiu, pokazanych poniżej, grup końcowych.



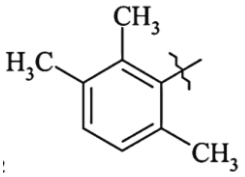
β (beta)



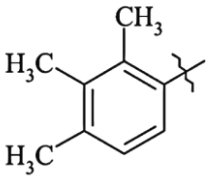
ε (epsilon)



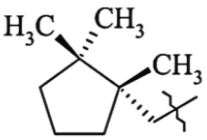
γ (gamma)



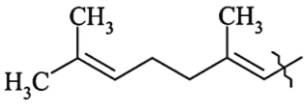
ϕ (phi)



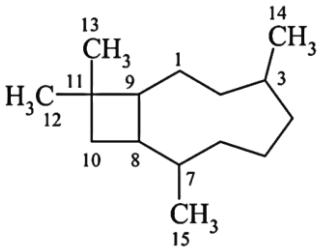
χ (chi)



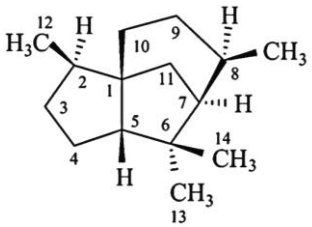
κ (kappa)



ψ (psi)

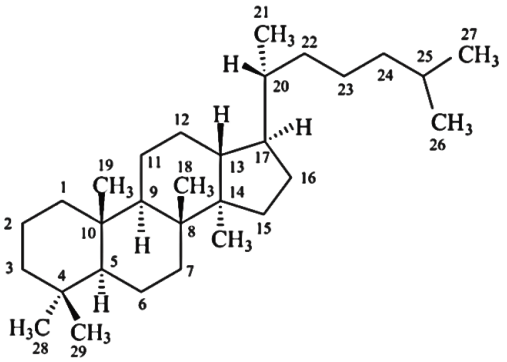


kariofilan**

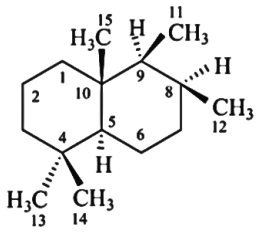


cedran**

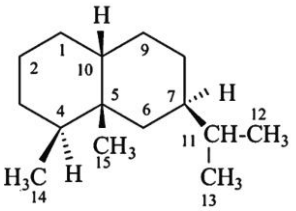
** Te struktury w CAS nazywa się systematycznie.



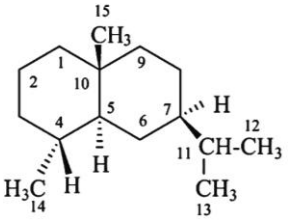
dammaran



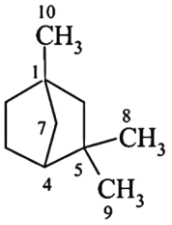
dryman**



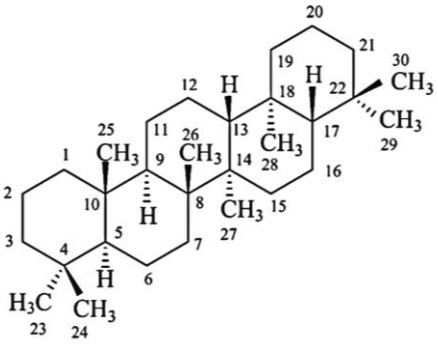
eremofilan**



eudesman**

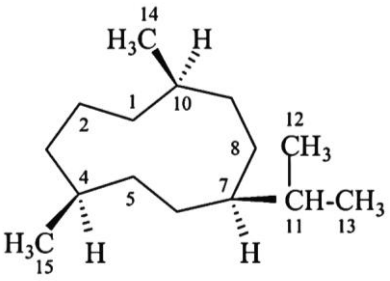


fenchan**

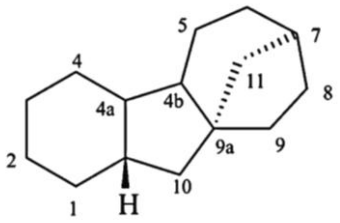


gammakeran

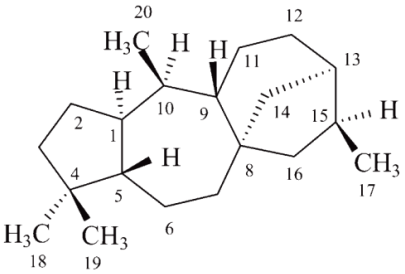
** Te struktury w CAS nazywa się systematycznie.



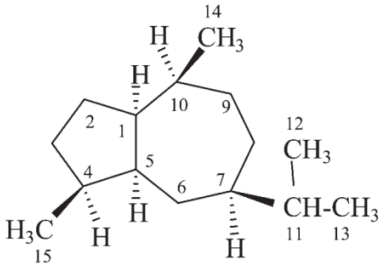
germakran**



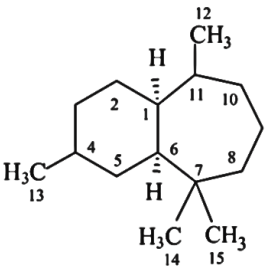
giban



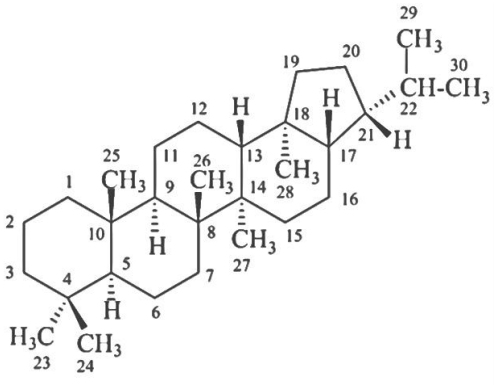
grajanotoksan



guajan**



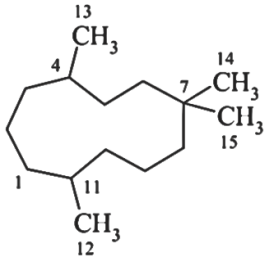
himachalan**



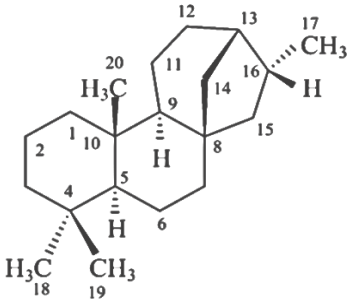
hopan††

** Te struktury w CAS nazywa się systematycznie.

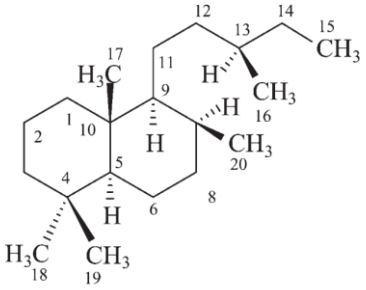
†† Nazwę CAS tej struktury wyprowadza się od gammaceranu



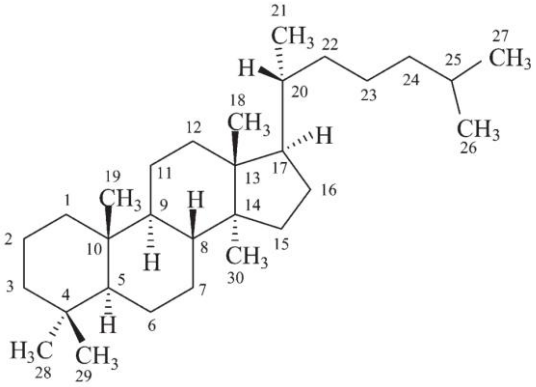
humulan**



kauran††

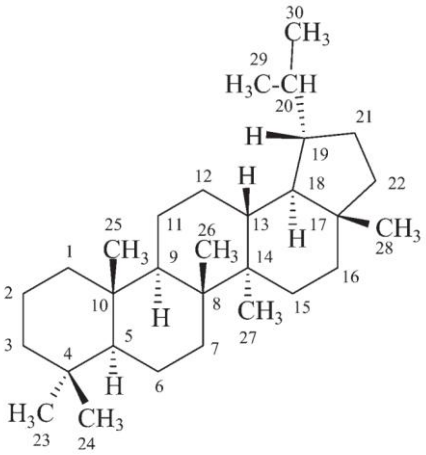


labdan**

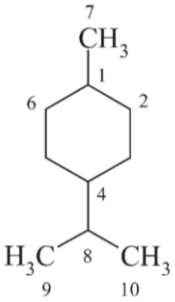


lanostan

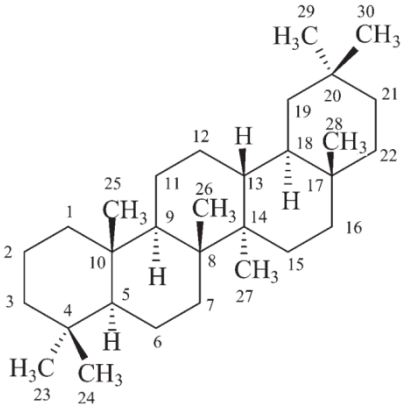
** Te struktury w CAS nazywa się systematycznie.
†† Nazwą tej struktury w CAS jest *ent*-stereoizomer.



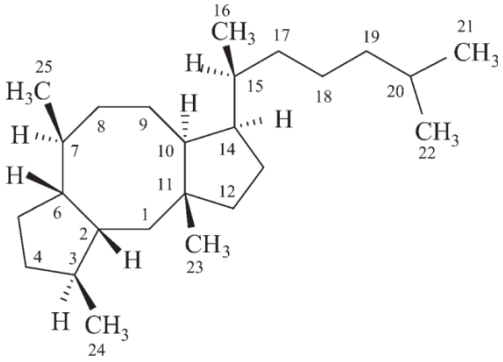
lupan



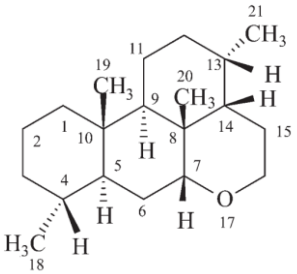
p-mentan**



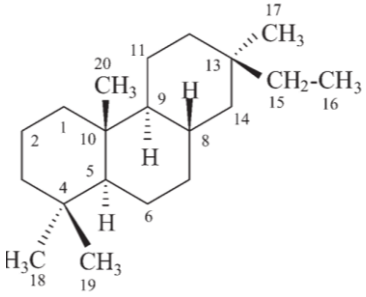
oleanan



ofiobolan**

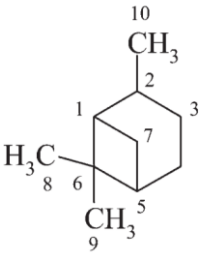


pikrasan

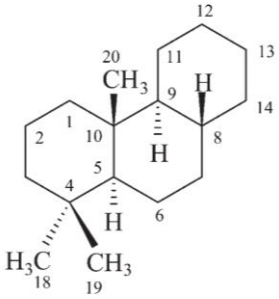


pimaran**

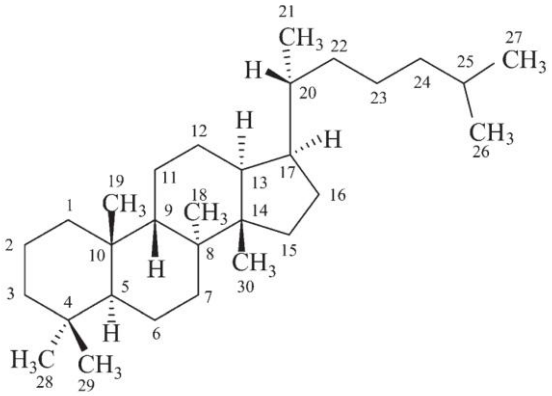
** Te struktury w CAS nazywa się systematycznie.



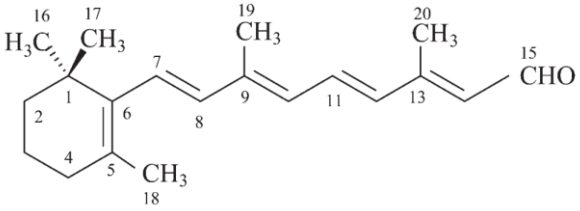
pinan**



podokarpan**

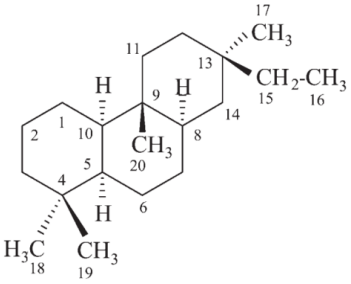


protostan††

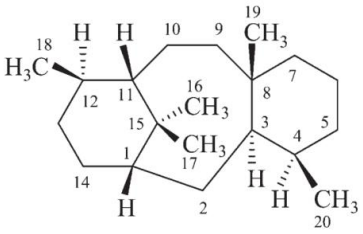


retinal

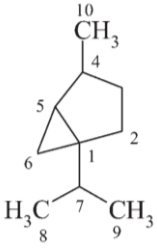
** Te struktury w CAS nazywa się systematycznie.



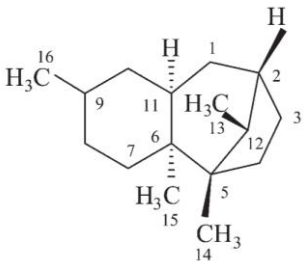
rozan**



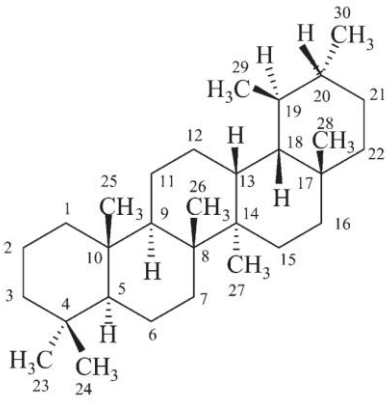
taksan**



tujan**

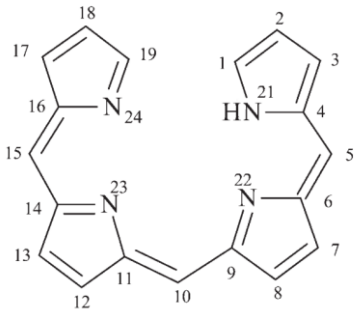


trichotekan

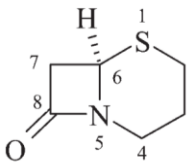


ursan

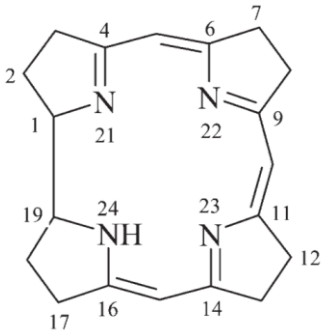
**Te struktury w CAS nazywa się systematycznie



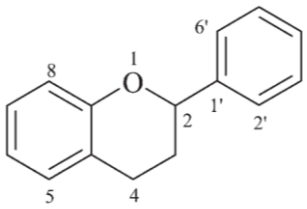
21*H*-bilin



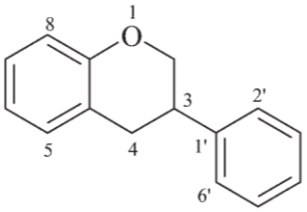
cefam**



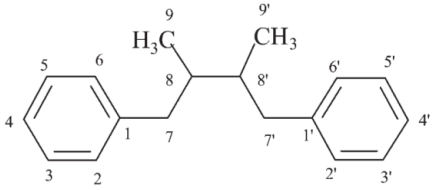
korryn



flawan**

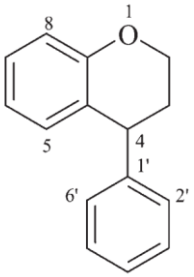


izoflawan**

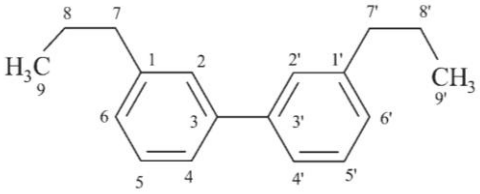


lignan
[wyłącznie z wiązaniem 8,8′ (β,β′)]

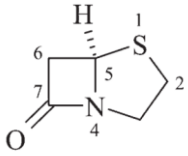
**Te struktury w CAS nazywa się systematycznie



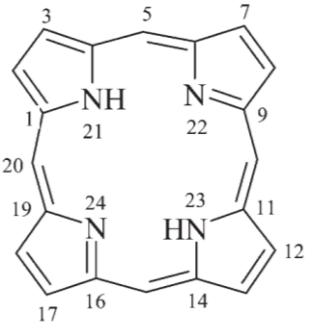
neoflawan**



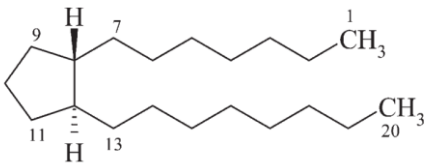
3,3′-neolignan
[i inne struktury nie połączone wiązaniem 8,8′ (β,β′)]



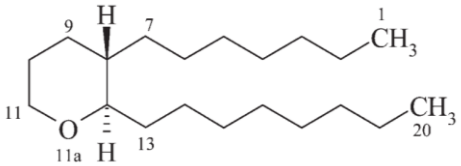
penam**



porfiryna††



prostan



tromboksan**

**Te struktury w CAS nazywa się systematycznie

††Tą strukturę w CAS nazywa się jako pochodną macierzystego wodorku porfiny