

И. Иванов

Номенклатура на органичните съединения

Номенклатурата (начинът за образуване на наименованията) на органичните съединения съществено отличава езика на химията от обикновените езици. Още повече, че писменото излагане на химичните знания е твърде важно, а то е немислимо без приемането на единни правила за назоваване на веществата.

Още във втората половина на 18. век сред химиците възникнала идеята, че наименованието на дадено вещество трябва еднозначно да съответствува на неговия състав, а не да възниква случайно, каквато е била практиката дотогава. Бързото развитие на органичната химия към края на 19. век поставило пред изследователите задачата да усъвършенствуват класификацията и номенклатурата на органичните съединения. Това довело до свикването през 1892 г. на конференция в Женева, където е била приета първата систематична номенклатура - т.нар. *Женевска номенклатура*. Нейните правила са непълни, но по принцип достатъчно приемливи, и се използват и до днес в някои издания.

В днешно време две основни групи учени разработват успоредно и усъвършенствуват правилата на химическата номенклатура: едната е в рамките на Международния съюз по чиста и приложна химия (*IUPAC* - International Union of Pure and Applied Chemistry), а другата - към американското реферативно списание *Chemical Abstracts* ("Химически извадки", съкр. *C.A.*). Двете системи - на *IUPAC* и на *C.A.* - са сходни, почиват върху близки принципи, но се развиват и усъвършенствуват относително самостоятелно. Номенклатурата на *Chemical Abstracts* се стреми повече към универсализация и приспособяване за компютърна обработка при съставянето на азбучни указатели.

В болшинството реномирани международни списания от областта на органичната химия се изисква спазването на номенклатурата на *IUPAC* (*ИЮПАК*). Основен принцип на тази съвременна систематична номенклатура е: наименованието да описва не само състава, но и - доколкото е възможно - строежа¹⁾ и конфигурацията на даденото съединение. От друга страна обаче всяка систематична номенклатура трябва да отчита и да използва установените в миналото традиции. Ето защо съвременната номенклатура представлява нееднородна смес от стари и нови наименования и правила. Проблемът още повече се усложнява от особеностите и традициите

¹⁾ *IUPAC* препоръчва понятието "конституция" (строеж) за природата и последователността на връзките в молекулата, а понятието "структура" в този смисъл би трябвало да се избягва.

в различните езици. Така например най-употребяваното название на дадено съединение на английски, немски, руски и български може да се различава:

CCl_4 - carbon tetrachloride (англ.)
- Tetrachlorkohlenstoff (нем.)
- четырёххлористый углерод (рус.)
- тетрахлорметан (бълг.)

$\text{H}_2\text{N}-\text{CO}-\text{NH}_2$ - urea (англ.)
- Harnstoff (нем.)
- мочеви́на (рус.)
- карбамид (бълг.)

Важно е да се знае, че по систематичната номенклатура на *IUPAC* за едно съединение могат да се съставят няколко наименования и всички те да са правилни, но на дадено наименование трябва да съответствува само едно единствено органично съединение.

Систематичните наименования на някои сложно построени съединения, напр. от растителен произход, са твърде дълги и трудни за разбиране. В такива случаи все още се дават или използват тривиални названия (напр. алкалоидите *морфин*, *папаверин*, *резерпин*, *никотин* и т.н.).

Основният комплект от правила на органичната номенклатура на *IUPAC* бе публикуван през 1969 г. Някои от тези правила изглеждат сложни, неопределени и дават възможности за различно тълкуване. Това затруднение произтича от желанието на *IUPAC* да запази възможно по-голяма част от използваните по традиция стари наименования. Ето защо тази номенклатура продължава да се усъвършенствува и периодично се появяват нови статии в списанията на *IUPAC*. Независимо от недостатъците ѝ обаче номенклатурата на *IUPAC* трябва да се изучава задълбочено от всички специалисти, чиято професия е свързана с органичните съединения. Такива специалисти разбира се са и фармацевтите.

Тук ще въведем само основните понятия и принципи на номенклатурата на *IUPAC*, а други важни правила и примери ще се разглеждат на място при изучаване на съответните класове органични съединения.

Съставни части на дадено наименование

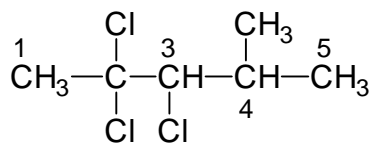
Както и всяко друго съществително име, наименованието на органичното съединение се състои от корен, представка, наставка и окончание. За илюстрация на Фиг. 1 е посочен пример - едно типично наименование по системата на *IUPAC*.

Функционална група - група от атоми, определяща функцията (т.е. химичния характер) на дадено съединение. За алкохолите това е хидроксилната група **-ОН**, за кетоните - карбонилната **>C=O**, за киселините е **-COOH** и т.н.

Главна (старша) група е функционалната група, чието наличие в молекулата трябва да се означава в наименованието чрез наставка. Ако в съединението има няколко функционални групи от различен тип, то главна е онази от тях, която трябва да се означава чрез наставка. Ето защо всички функционални групи се подреждат по старшинство (вж. *Таблица 1*) и за главна се избира най-старшата от групите, намиращи се в молекулата. Главната група определя началото на номерацията и, ако е възможно, се включва в главната верига при съставяне на наименованието. Не всички заместители могат да бъдат главна група - някои от тях се означават само чрез представки (вж. *Таблица 2* на стр. 8).

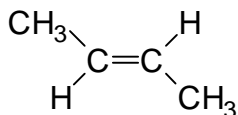
Локант - така се нарича цифрата или буквата, която показва мястото на даден атом, кратна връзка или функционална група в молекулата (Фиг. 1). Цифрите-локанти се подреждат по възходящ, а буквите - по азбучен ред (по латинската или гръцката азбука).

Правописни правила. Те са многобройни и сложни и могат да се различават в различните езици. У нас е прието следното основно правило: между цифри се пише запетая, между цифра и буква - малко тире, а отделните буквени съставни части се пишат слято. Например:

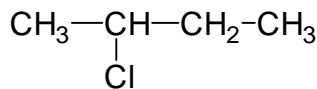


4-метил-2,2,3-трихлоропентан

Представки като *цис-*, *транс-*, *еритро-*, *трео-* и съкращения като *втор-* (вторичен) и *трет-* (третичен) се пишат с *курсив* и се отделят с тиренце, например:



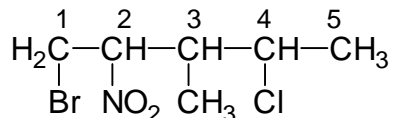
транс-2-бутен
E-2-бутен



втор-бутилхлорид

Геометричните изомери освен с *цис-* и *транс-* се означават и с главни курсивни букви съответно *Z-* и *E-* (от немските думи *zusammen* и *entgegen*).

Представките в наименованието се подреждат по азбучен ред! Например:



1-бromo-3-метил-2-нитро-4-хлоропентан
(англ.: 1-bromo-4-chloro-3-methyl-2-nitropentane)

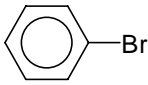
Разбира се азбучният ред зависи от това, на коя азбука е написано наименованието.

Основни принципи на номенклатурата по *IUPAC*

Указанията на *IUPAC* разграничават два главни типа: (а) заместителна и (б) радикало-функционална номенклатура.

Съгласно първия тип всяко съединение се разглежда като производно на наситен, ненаситен или цикличен въглеродород с неразклонена верига, в който водородни атоми са заместени с други атоми или групи.

Вторият тип - както показва названието му - дава възможност наименованието на дадено съединение да се състави от името на съответния въглеродороден радикал и името на функционалната група, свързана с него. Примери за названия на едно и също съединение по двата типа номенклатура са дадени в следната таблица:

Формула	По заместителната номенклатура	По радикало-функционалната номенклатура
$\text{CH}_3\text{-OH}$	метанол	метил(ов) алкохол
$\text{CH}_3\text{-CO-CH}_2\text{CH}_3$	бутанон	етилметил(ов) кетон
	бромобензен	фенил(ов) бромид
$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH(NH}_2\text{)-CH}_3$	2-аминобутан	втор-бутиламин

Заместителната номенклатура има по-универсално приложение и затова ще разгледаме по-подробно нейните принципи. Преди да се пристъпи към съставяне на наименованието трябва да се извършат последователно следните логически операции:

1. Да се разгледат всички заместващи групи (OH , NH_2 , COOH , OCH_3 , COOC_2H_5 , SO_3H и др.) и между тях да се избере най-старшата, която се нарича главна група. Старшинството на функционалните групи се определя

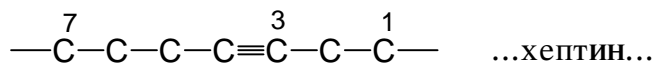
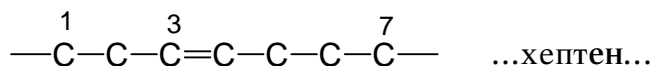
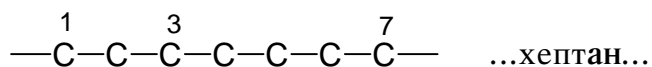
съгласно *Таблица 1*. Изборът на главна група е решаващ за наименованието и за номерацията на въглеродните атоми. В редица случаи обаче може въобще да **няма** главна група, т.е. такава, която се означава чрез **наставка** в наименованието. Това е възможно, когато: (а) съединението е незаместен въглеводород или хетероцикъл и (б) съединението има само такива заместители, които задължително се означават с представки (вж. Таблица 2).

2. Да се избере т.нар. **главна верига** - това е възможно най-дългата неразклонена въглеводородна верига, включваща максимален брой двойни и тройни връзки, към която е свързана главната група. Ако в молекулата има няколко еднакви главни групи, за главна се счита веригата, която съдържа максимален брой от тях. В случай, че молекулата съдържа цикъл, за главна се избира веригата на пръстена (цикъла), към който е присъединена главната група. В тези случаи непосредствено **пред корена** се добавя представката **цикло-**, напр. 1-метилциклохексен, циклобутанон, 3-хлоро-2-циклопентенкарбоксилна киселина и т.н.

3. Главната верига се **номерира** при съобразяване с кратните връзки (двойната връзка е *по-старша* от тройната), като при това въглеродният атом, към който е свързана главната група, трябва да получи възможно най-малък номер. Ако главната верига включва въглероден атом от самата главна група, този атом получава възможно най-малък номер (често 1). Когато въглеродният атом от главната група носи *No. 1*, за опростяване локантът 1 се изпуска (например 3-бром-4-хептинал - вж. на стр. 7).

4. Накрая се назовава главната верига, добавя се наставка за главната група, а всички останали групи се означават с представки, подредени *по азбучен ред*. Местата на кратните връзки и заместителите към главната верига се означават с локанти (цифри или букви). Така се образува пълното наименование.

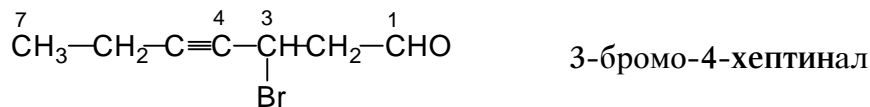
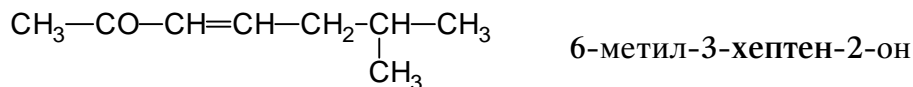
Коренът на названието на главната верига се дава от наименованието на алкана със същия брой въглеродни атоми, като за липса на кратни връзки (наситена верига) към корена се добавя наставката "ан", за двойна връзка - "ен" (със съответен локант) и за тройна - "ин" (с локант), например



Ето примерни съединения, включващи тези три главни вериги:



1-хептанол



Изброените в *Табл. 1* класове съединения, чиито групи могат да бъдат главни по заместителната номенклатура, се означават като наставки. Ако в молекулата има две, три или повече еднакви групи, възприемани като главни, това се отразява в наименованието с т.нар. *умножаващи частици*: ди-, три-, тетра-, пента- и т.н., например 1,3-хександИол, 1,3,5-пентан-ТРИкарбоксилна киселина, пропанДИова киселина. Умножаващите частици за сложни, обемисти заместители са бис-, трис-, тетракис- и т.н. Началните букви на умножаващите частици не се отчитат при подреждане на представките по азбучен ред, напр. за тетрабутил- важи буквата б.

Посочените *умножаващи частици* се използват в номенклатурата за отразяване на еднакви структурни елементи от всякакъв тип.

В *Таблица 2* са дадени групите, които в заместителната номенклатура обикновено се означават само чрез *представки*.

Често едно съединение може да съдържа няколко различни групи от посочените в *Таблица 1*. Тъй като съгласно правилото *САМО ЕДНА* от тях (*най-старшата*) се означава с наставка, а останалите - чрез представки, то трябва да се съблюдава старшинството, приведено в таблицата. Ето защо за тези групи са предвидени и наставки, и представки (*Таблица 3*). Както става ясно, таблиците 1-3 са много важни за номенклатурата на *IUPAC*. Освен изброеното дотук те съдържат и класификация на органичните съединения.

Номерация на главната верига

Правилата на *IUPAC* препоръчват при избора на номерацията да се вземат предвид следните молекулни фрагменти в приведената по-долу последователност - до достигане на окончателно решение:

- (1) главните групи;
- (2) двойните връзки;
- (3) тройните връзки;
- (4) атомите и групите, означавани чрез представки;
- (5) групата, означена първа по азбучния ред на представките.

Тези фрагменти в последователност отгоре-надолу трябва да получават възможния най-малък номер.

Таблица 1: Класове съединения, подредени по *намаляващо* старшинство на техните функционални групи, които могат да се означават като **главни групи**

1. Ониеви йони:	оксониеви амониеви	$=O^{+}$ - $=N^{+}=\$	(най-старши) ↓
2. Киселини:	карбоксилни сулфонови	-COOH -SO ₂ OH	↓
3. Производни на киселините:	анхидриди естери ацилхалогениди амиди хидразиди амидини	-CO.O.CO- -COOR -CO.Hal -CO.NH ₂ и т.н. -CO.NHNH ₂ и т.н. -C(=NH)NH ₂ и т.н.	↓
4. Нитрили (цианиди) Изонитрили	-CN -NC		↓
5. Алдехиди Тиоалдехиди	-CH=O -CH=S		↓
6. Кетони Тиокетони	>C=O >C=S		↓
7. Хидроксилни производни:	алкохоли феноли тиоалкохоли тиофеноли	-OH -OH -SH -SH	↓
8. Амини Имини Хидразини	-NH ₂ , -NHR, =NH, =N-R -NHNH ₂ ,	-NR ₂ -NHNH-R	↓ (най-младши)

Таблица 2: Заместители, които се означават само с представки.

Група	Представка	Група	Представка
-F	флуоро-	-N=O	нитрозо-
-Cl	хлоро-	-NO ₂	нитро-
-Br	бромо-	-OR	R-окси-
-I	йодо-		(напр. алкилокси-)
=N ₂	диазо-	-SR	R-тио-
			(напр. алкилтио-)
-N ₃	азидо-	-R	алкил-
		-Ar	арил-

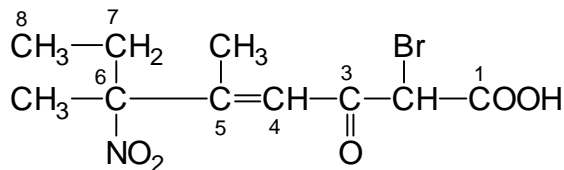
Таблица 3: Означения на най-важните групи чрез *представки* или *наставки*²⁾ в заместителната номенклатура на IUPAC (в ред на спадащо старшинство).

Клас органични съединения	Формула	Чрез представка	Чрез наставка
Катиони	$=N^+=$ $=O^+-$	-онио- -ониа-	-ониев...
Карбоксилни киселини	-COOH -(C)OOH	карбокси- -	карбоксилна киселина -ова киселина
Сулфонови киселини	-SO ₃ H	сулфо-	-сулфонова киселина
Соли	-COO-M ⁺ -(C)OO-M ⁺	- -	метален ...карбоксилат метален ...-оат
Естери	-COOR -(C)OOR	R-оксикарбонил- -	R ...карбоксилат R ...-оат
Ацилхалогениди	-CO-Hal -(C)O-Hal	халоформил- -	...карбонил- халогенид ...-оилхалогенид
Амиди	-CO-NH ₂ -(C)O-NH ₂	карбамоил- -	-карбоксамид -амид
Нитрили	-CN -(C)N	циано- -	-карбонитрил -нитрил
Алдехиди	-CHO -(C)HO	формил- оксо-	-карбалдехид -ал
Кетони	>(C)=O	оксо-	-он
Алкохоли Феноли	-OH	хидрокси-	-ол
Тиоли	-SH	меркапто-	-тиол
Амини	-NH ₂	амино-	-амин
Имини	=NH	имино-	-имин
Етери	-OR	R-окси-	-
Сулфиди	-SR	R-тио-	-

²⁾ Когато въглеродният атом от функционалната група (ограден в скоби) е член на главната верига и следователно е номериран, се използва съответната алтернативна наставка или представка.

**ПРИМЕРИ за приложение
на заместителната номенклатура на IUPAC**

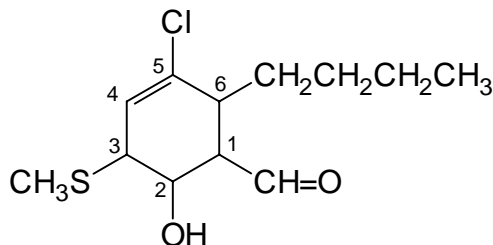
Пример 1. Да се състави систематичното наименование на следното съединение:



Начин на разсъждение: (1) Две са възможните главни групи: $>C=O$ и $-COOH$, от тях обаче карбоксилната е по-старша (Табл. 3) и трябва да получи най-малък номер **1**; (2) най-дългата неразклонена верига, включваща двойната връзка и най-много заместители, е от осем въглеродни атома, т.е. коренът на наименованието ще бъде **-окт-**, ако добавим и двойната връзка с локант **4**, основата на наименованието става **...-4-октен-...**; (3) означаваме главната група чрез съответната наставка: **...-4-октенова киселина**; (4) останалите заместители се назовават чрез представки, подредени по азбучен ред. Така стигаме до окончателното название:

2-бromo-5,6-диметил-6-нитро-3-оксо-4-октенова киселина

Пример 2. Да се състави систематичното наименование на следното съединение:



Начин на разсъждение: (1) От двете функционални групи $-OH$ и $-CHO$, които могат да бъдат главни, по-старша е алдехидната и тя ще се означава чрез наставка; (2) главна верига е пръстенът (цикло-) от шест въглеродни атома, а номерацията започва от този от тях, с който е свързана главната група, и расте в посока към следващата по старшинство група $-OH$; като вземем предвид и двойната връзка (с нейния локант **4**) получаваме за основа на наименованието: **...-4-циклохексен-...**; (3) главната група се отразява чрез наставката **-карбалдехид**, тъй като нейният въглероден атом не е член на главната верига! (4) останалите групи означаваме с представки по азбучен ред:

6-бутил-3-метилтио-2-хидрокси-5-хлоро-4-циклохексен-1-карбалдехид

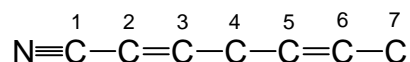
(локантът **1** пред **"-карбалдехид"** може да се изпусне, тъй като се подразбира).

А сега един обратен пример - от наименование да се напише формулата. Ако наименованието е съставено правилно и пълно, от него трябва да може да се изведе само една конституционна формула!

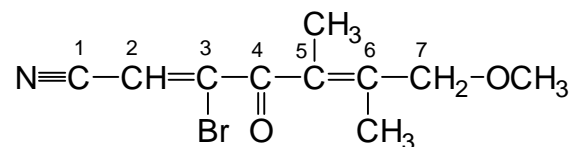
Пример 3. Да се напише конституционна (структурна) формула, съответстваща на наименованието:

3-бromo-5,6-диметил-7-метилокси-4-оксо-2,5-хептадиенонитрил

Разсъждения: (1) Главната верига има седем въглеродни атома (...хепт...) и две двойни връзки на второ и пето място (2,5-...диен...), като *No.1* е въглеродният атом от цианогрупата (...нитрил), т.е. той се включва в главната верига (*Табл. 3*); (2) написваме всичко това по следния начин:



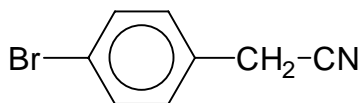
(3) в съответствие с локантите свързваме групите, означени чрез представки, и допълваме оставащите свободни валенции на въглеродните атоми с водородни атоми (всички въглеродни атоми трябва да са четиривалентни):



В наименованието не бе посочено пространственото разположение на заместителите при двойните връзки (*цис-* или *транс-*, съотв. *Z-* или *E-*), поради което на горната формула ще съответствуват няколко пространствени изомера, т.е. няколко различни вещества (колко?).

Особености на радикало-функционалната номенклатура

В радикало-функционалните наименования последната част (или втората дума) показва *химичната функция*, а предхождащите части - структурните особености на молекулата. В *Таблица 4* са дадени класовете съединения в ред на понижавашо се старшинство. Примери: етилов алкохол (ethyl alcohol), бутилхлорид (butyl chloride), изопропилметилкетон (isopropyl methyl ketone), бензилцианид (benzyl cyanide) и т.н. При наличие на няколко групи по-старшата се означава като функция, а останалите - с представки, например:



p-бромобензилцианид
(*p*-bromobenzyl cyanide)

Ако функцията представлява двувалентна група, като напр. $>C=O$ или $-O-$, присъединените към нея две различни групи (радикали) се изброяват в азбучен ред, а ако са еднакви - с умножаващата представка ди-, например бензилфенилов етер ($C_6H_5CH_2-O-C_6H_5$), диетилов етер ($C_2H_5-O-C_2H_5$), диметилсулфоксид ($CH_3-SO-CH_3$) и др.

Таблица 4: Наименования на класове съединения, използвани в радикало-функционалната номенклатура.

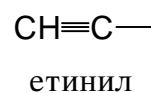
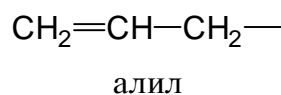
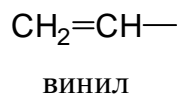
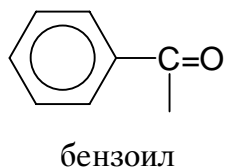
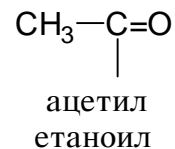
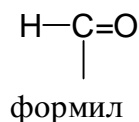
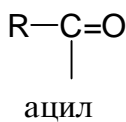
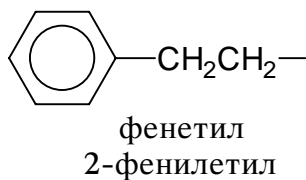
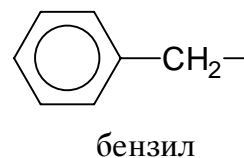
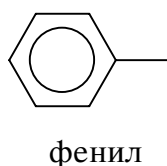
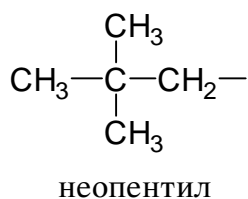
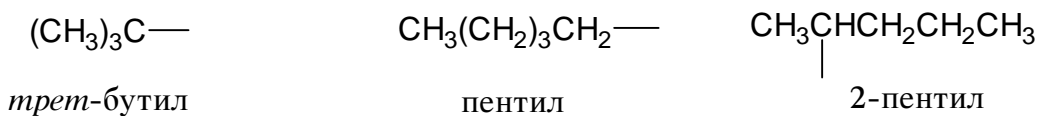
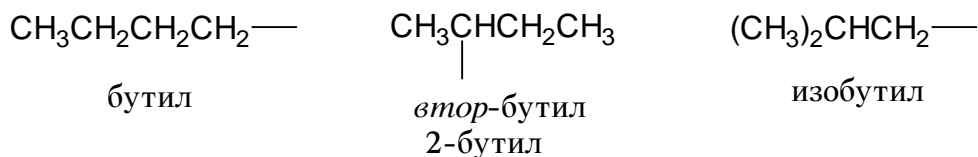
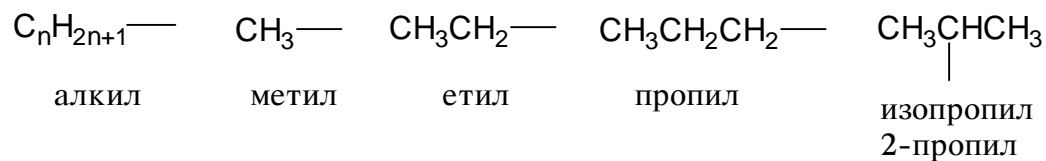
Група	Наименование
$-CN, -NC$	Цианид, изоцианид
$>C=O$	Кетон
$>C=S$	Тиокетон
$-OH$	Алкохол
$-SH$	Тиоалкохол
$-NH_2$	Амин
$-O-$	Етер
$-S-$	Сулфид
$-SO-$	Сулфоксид (сулфокис)
$-F, -Cl, -Br, -I$	Флуорид, хлорид, бромид, йодид
$-N_3$	Азид

Таблиците 1-4 не претендират за пълнота, изброените дотук правила също далеч не изчерпват всичко. Например специални правила помагат за назоваване на полициклични или хетероциклени системи.

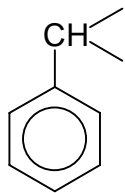
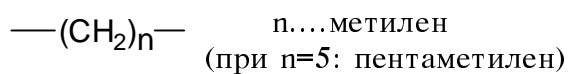
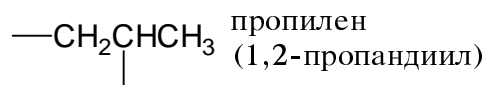
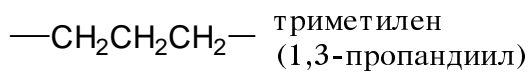
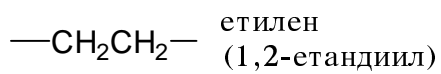
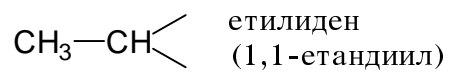
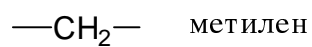
Тези и други правила ще се допълват и въвеждат постепенно с изучаване на отделните класове органични съединения. Някои специалисти изучават номенклатурата на *IUPAC* дори като самостоятелен предмет, а множество учени продължават непрекъснато да я усъвършенствуват.

Наименования на радикалите

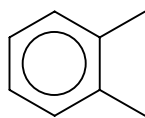
Наименованието на въглеводородните и другите едновалентни остатъци (радикали) се образува чрез наставката **-ил**. При това се заменят наставките **-ан**, **-ен** и **-ин** съответно с **-ил**, **-енил** или **-инил**, например метил, 2-бутенил. По-долу са изброени строежът и названията на някои най-важни радикали:



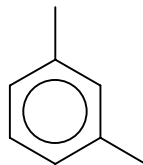
Систематичните наименования на двувалентните остатъци се образуват с наставката -диил. Ето например названията на някои по-важни двувалентни въглеводородни остатъци:



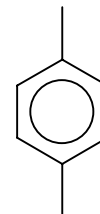
бензилиден



o-фенилен



m-фенилен



p-фенилен

Version 3.1;
19 January, 2000