

Organické názvosloví

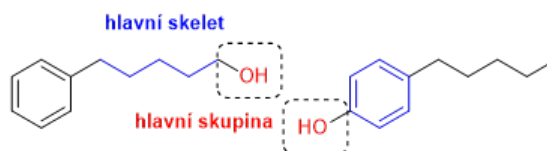
Úvod do derivátů uhlovodíků

Po probrání základních struktur uhlovodíků přichází těžší část systematického názvosloví organických sloučenin. Jak už jsme se v několika předešlých lekcích zmínili, hrají velkou roli tzv. „*názvoslovné priority*“. Dovolím si zde opět umístit tabulku, podle které se postupuje při pojmenovávání organických struktur. Viz následující tabulka:

I. Stanovení hlavní skupiny
II. Stanovení hlavního řetězce, který musí obsahovat (seřazeno dle klesající priority): a) maximální počet hlavních skupin b) maximální počet násobných vazeb (zahrnují se do zakončení) c) maximální počet uhlíkových atomů
III. Číslování hlavního řetězce: a) hlavní skupina skupina nese co nejmenší číselný lokant (v případě nerozhodnutí násobné vazby atd.)
IV. Stanovení úplného názvu: a) z předpon (prefixů) substituentů označených číselnými lokanty a seřazených podle mezinárodní abecedy, dále z kmene názvu odpovídajícího alkanu hlavního řetězce a konečně ze zakončení, které se skládá z přípon, z nichž první dvě označují nenasycenost řetězce (první -en, poté -yn) a třetí hlavní skupinu

Tabulka 1: Přehled tvoření názvu v organické chemii. (zdroj: <http://canov.jergym.cz/>)

Nyní nás nejvíce bude zajímat stanovení hlavní skupiny na skeletu organické látky. Jak můžete vidět v přiložené tabulce výše, jedná se o zcela první krok! To znamená, že hlavní skupiny (skupina s nejvyšší názvoslovnou prioritou) určuje strukturu hlavního skeletu a následně i zbytky, které jsou na danou strukturu napojeny. Demonstrujme na následném příkladu:



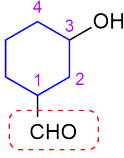
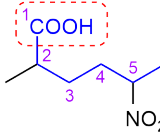
Obrázek 1: Příklad výběru hlavního řetězce na základě přítomnosti hlavní skupiny.

Nyní je nutné si uvést, jaké jsou druhy hlavních skupiny a jakou mají názvoslovnou prioritu při pojmenovávání organických sloučenin. Následující tabulka je seřazena podle klesajících priorit:

Charaktristická skupina	vzorec	předpona	přípona
Kationty	(+)	- onio -	- onium
Karboxylové kyselin	$-COOH$	karboxy -	- ová kyseliny - karboxylová kyseliny
Sulfonová kyseliny	$-SO_3H$	sulfo -	- sulfonová kyseliny
Anhydridy	$-CO - O - CO$		- anhydrid - karboxanhydrid (anhydrid - ové kyseliny)
Soli	$-COO^- M^+$		kation - ... - oát kation - ... - karboxylát
Estery	$-COOR$	alkoxykarbonyl -	alkyl - ... - oát alkyl - ... - karboxylát (alkylester - ové kyseliny)
Acylhalogenidy	$-COX$	halogenkarbonyl -	- oylhalogenid -karbonylhalogenid
Amidy	$-CONH_2$	karbamoyl - (aminokarbonyl)	- amid - karboxamid (amid-ové kyseliny)
Hydrazidy	$-CONHNH_2$	(hydrazinokarbonyl)	- ohydrazid - karbohydrazid
Imidy	$-CO - NH - CO -$		- imid - dikarboximid
Nitrily	$-CN$	kyan -	- nitril - karbonitril
Aldehydy	$-CH = O$	oxo - formyl -	- al - karbaldehyd
Ketony	$-CO -$	oxo -	- on
Alkoholy	$-OH$	kydroxy -	- ol
Thioly	$-SH$	sulfanyl -	- thiol
Aminy	$-NH_2$	amino -	- amin
Iminy	$= NH$	imino -	- imin
Hydraziny	$-NHNH_2$	hydrazino -	-hydrazin
Ethery	$-OR$	alkoxy -	
Sulfidy	$-SR$	alkylsulfanyl -	
Halogensloučeniny	$-X$	halogen -	
Nitrosloučeniny	$-NO_2$	nitro -	

Tabulka 2: Přehled funkčních skupin (seřazené podle klesající priority).

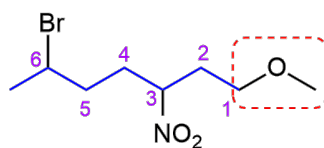
Následující tabulka uvádí funkční skupiny podle klesající priority. Funkčním skupinám přiřazuje název chemické skupiny, příslušný vzorec, předponu (prefix) a příponu (sufix). Z tabulky je patrné, že většina funkčních skupin má předponu i příponu. Některé jednodušší funkční skupiny (etherová, nitro, atd.) mají pouze předponu. U funkčních skupin, které obsahují ve své struktuře atom uhlíku, jsou pak možné přípony dvě. Jejich použití závisí na tom, zda tento uhlík je obsažen v základní struktuře, první (horní) předpona, či není součástí základního skeletu, druhá (spodní) předpona.

hlavní skupina mimo hlavní skelet = dolní (druhý) sufix  3-hydroxycyklohexan-1-karbaldehyd	hlavní skupina v rámci hlavního skeletu = horní (první) sufix  2-methyl-5-nitrohexanová kyselina (lze zapsat opisovým tvarem)	hlavní skupina hlavní skelet substituenty
---	---	--

Obrázek 2: Ukázka použití přípon a předpon.

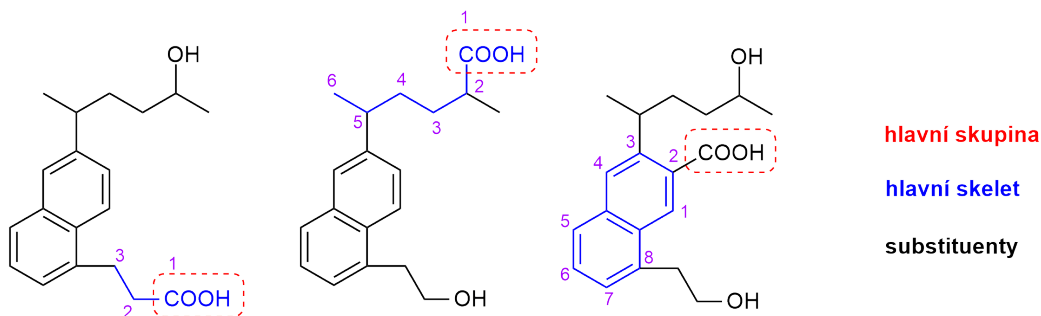
Je dobré si uvědomit, že acyklických základů názvů budeme zpravidla používat první (horní) předponu, zatímco cyklický základ názvu vyžaduje použití druhé (spodní) předpony. Pro lepší zapamatování poměrně rozsáhlé tabulky existuje „mnemotechnická pomůcka“: **Priorita jednotlivých funkčních skupin klesá s klesajícím oxidačním stupněm uhlíku (síry).**

Pokud budeme popisovat strukturu se skupinami, které nemají sufix (příponu), použijeme pouze předpony. Viz následující řetězec:



6-brom-1-methoxy-2-nitroheptan

Z následujícího příkladu struktur vyplývá, že skupiny s vyšší prioritou mají vliv na výběr struktury hlavního řetězce a číslování dané struktury.



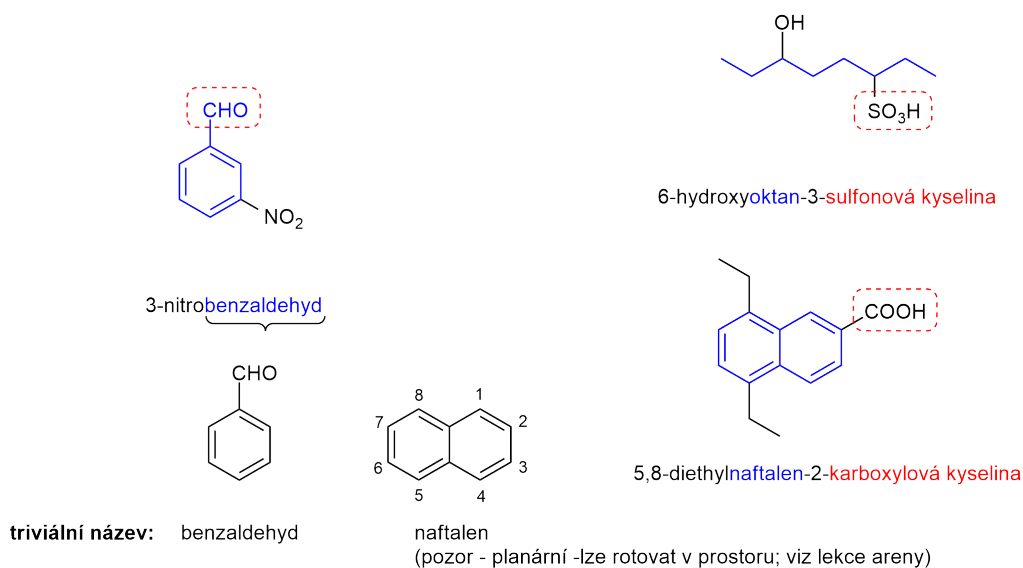
Obrázek 3: Demonstrace různého umístění hlavní funkční skupiny na struktuře organické látky a následné změny výběru základního řetězce a číslování.

Výběr základního (hlavního) skeletu je pro vytvoření názvu nezbytné, poněvadž od něho odvozujeme např. číslování. Výběr se řídí následujícími pravidly, kdy základní struktura musí obsahovat (seřazeno podle klesající priority výběru):

1. nejprve funkční skupinu s nejvyšší prioritou (použití přípony v názvu celé struktury)

2. následně maximum dvojných a/nebo trojných vazeb; dvojně vazby mají přednost před trojnými
3. největší množství ostatních substituentů vyjádřených předponami (pokud nelze strukturu jednoznačně určit podle předešlých bodů) = nejdelší řetězec

Za zmínku také stojí skutečnost, že základní struktura (hlavní skelet) tvoří kořen názvu sloučeniny, ke které se připojují přípony a předpony. Kořen je buď alkan, nebo aren (triviální název). Všimněte si, že u arenů se nečísluje od uhlíku, kde je navázána hlavní funkční skupina, ale je respektováno číslování arenu jako celku!

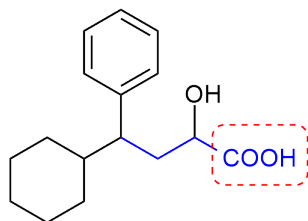


Obrázek 4: Základy názvů a jejich číslování.

Stejně důležité je číslování základních struktur. Přiřazujeme nejnížší lokanty (opět podle klesající priority):

1. funkčním skupinám s nejvyšší prioritou
2. dvojným a trojným vazbám
3. substituentům (vyjádřené předponami)

U lineárních řetězců kvůli jednoznačnosti musíme číslovat od konce řetězce, zároveň dbáme výše uvedených zásad. Cyklické sloučeniny jsou číslovány od uhlíky, kde se nachází hlavní funkční skupina. Pokud je přiřazen hlavní funkční skupině, vyjádřena v příponě, lokant č. 1, lze ho vynechat.



2-hydroxy-4-fenyl-4-cyklohexylbutan-1-ová kyselina
=
2-hydroxy-4-fenyl-4-cyklohexylbutanová kyselina

Obrázek 5: Vynecháním lokantu č. 1 u přípony (hlavní funkční skupiny) se význam nemění.

Autor: Jan Vrtílka