

Kimika Organikoaren Nomenklaturarako Gida Laburra

K.-H. Hellwich (Alemania), R. M. Hartshorn (Zelanda Berria), A. Yerin (Errusia), T. Damhus (Danimarka), A. T. Hutton (Hegoafrika). E-mail: organic.nomenclature@iupac.org Erakunde babeslea: Nomenklatura Kimikoa eta Egitura-Irudikapenaren IUPAC Saila.

Itzulpena eta moldaketa: Liherr Prieto eta Uxue Uria (Espainia). E-mail: liherr.prieto@ehu.es

1 SARRERA

Hitzartutako nomenklatura unibertsal baten onarpena funtsezko tresna da komunikazio eraginkorra izateko zientzia kimikoetan, industrian eta inportazio/espazio edo osasun eta segurtasunarekin lotutako araudietan.

Kimika Purua eta Aplikatuaren Nazioarteko Batasunak (IUPAC ingelesezko siglak) nomenklaturaren alderdi askoren buruzko gomendioak ezartzen ditu.¹ Nomenklatura organikoaren oinarriak laburbiltzen dira hemen, eta badira kimika ez-organikoen² eta polimero kimikaren³ nomenklaturari buruzko dokumentu osagarriak hiperestekekin jatorrizko dokumentuetara. Nomenklatura kimikoaren laburpen osoa aurki daiteke *Principles of Chemical Nomenclature*-en.⁴ Xehetasuneko deskribapena *Nomenclature of Organic Chemistry*-n aurki daiteke, Liburu Urdina bezala ezaguna,⁵ eta konposatu ez-organiko (*Liburu Gorria*),⁶ eta polimeroentzako (*Liburu Morea*)⁷ erlaziozko argitalpenetan.

Kontuan izan behar da konposatu askok izen ez-sistematiko edo izen erdi-sistematikoak izan ditzaketela eta IUPAC arauak izen sistematiko bat baino gehiago onartzen dutela maiz. Izen tradizional batzuk (e.g. estirenoa, urea) nomenklatura sistematikoaren barruan ere erabiltzen dira. Liburu Urdinaren edizio berriak,⁵ irizpide hierarkikoak biltzen ditu hobetsitako izen bakarra aukeratzeko, helburu arautzaileetarako lehenetsiko dena IUPAC izena delakoa Preferred IUPAC Name edo PIN.

2 ORDEZKAPEN NOMENKLATURA

Ordezkapen nomenklatura da konposatu kimiko organikoak izendatzeko metodo nagusia. Karbonoz eta 13-17 taldeetako elementuez osatutako konposatuekin erabiltzen da batez ere. Izendatzeko orduan, konposatu kimikoak konposatu aitzindari (5. Atala) eta talde bereizgarrien (funtzionalen), arteko konbinazio bezala tratatzen dira, non talde funtzional bat nagusizat hartzen den (4. Atala). Izen sistematikoa konposatu aitzindari nagusiaren izenean oinarritzen da (6. Atala), zeinetan hidrogeno atomoen ordezkapena atzizkien bitartez talde funtzional nagusia(k) adierazten d(ir)a, aurrizkiak nagusitasun txikiagoko talde funtzional eta bestelako ordezkatzailen adierazleak izanik, eta lekutzaileak hauen kokapena zehazteko. Ordezkapen nomenklaturaren arabera sortutako izenak, beste nomenklatura moten izen zatiak edo eragiketak izan ditzakete. Adibidez, adizio eta kenketa eragiketak (5.4. Atala) hidrogenazio egoera adierazteko burutzen dira batez ere, berriz ordezkapen eragiketak (gehienetan) karbono atomo baten ordezkapena heteroatomo batekin adierazten dute.

2.1 Ordezkapen izen sistematikoen osagaiak

Ordezkapen izen kimiko baten osagai ohikoenak aurkezten dira 1. Taulan irudikatutako egitura kimikoarentzat, izen sistematiko eta izen honen osagaiekin batera.

Lekutzaileak ordezkatzailen edo bestelako egitura ezaugarrien kokapena adierazten dute. Orokorrean, lekutzaileak egitura ezaugarri dagozkien izen zatiaren aurretik agertzen dira. Hiru motako inguratzaile marka erabiltzen dira, taldeka ordenatuak {[()]}, izen batean zein atal batera doala adieraztea beharrezkoa denenean erabiliak.

Jatorrizko ingelesezko bertsioa aipatzeko, erabili arren: IUPAC, *Pure Appl. Chem.* 2020, <<https://doi.org/10.1515/pac-2019-0104>>. Dokumentu honen argitalpena edozein hedabidetan onartua dago, baldin eta osorik eta aldaketarik gabe egina bada. Copyright © IUPAC & De Gruyter 2020.

¹ Eskuragarri doan (a) <https://www.degruyter.com/view/j/pac>;

(b) <https://www.qmul.ac.uk/sbcs/iupac/>.

² R. M. Hartshorn *et al.*, Brief Guide to the Nomenclature of Inorganic Chemistry, *Pure Appl. Chem.* **87**(9–10), 1039–1049 (2015).

³ R. C. Hiorns *et al.*, A Brief Guide to Polymer Nomenclature, *Pure Appl. Chem.* **84**(10), 2167–2169 (2012).

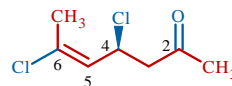
⁴ G. J. Leigh (Ed.), *Principles of Chemical Nomenclature – A Guide to IUPAC Recommendations, 2011 Edition*, RSC Publishing, Cambridge, U.K., ISBN 978-1-84973-007-5.

⁵ H. A. Favre, W. H. Powell (Eds.), *Nomenclature of Organic Chemistry – IUPAC Recommendations and Preferred Names 2013*, Royal Society of Chemistry, Cambridge, U.K., ISBN 978-0-85404-182-4; Zuzenketak, aldaketak eta hepadena: <https://www.qmul.ac.uk/sbcs/iupac/bibliog/BBerrors.html>.

⁶ N. G. Connelly, T. Damhus, R. M. Hartshorn, A. T. Hutton (Eds.), *Nomenclature of Inorganic Chemistry – IUPAC Recommendations 2005*, RSC Publishing, Cambridge, U.K., ISBN 0-85404-438-8.

⁷ R. G. Jones, J. Kahovec, R. Stepto, E. S. Wilks, M. Hess, T. Kitayama, W. V. Metanowski (Eds.), *Compendium of Polymer Terminology and Nomenclature – IUPAC Recommendations 2008*, RSC Publishing, Cambridge, U.K., ISBN 978-0-85404-491-7.

1. Taula: Ordezkapen izenaren osagaiak (4*S*,5*E*)-4,6-di-klorohept-5-en-2-ona -rentzat



hept(a)	konposatu aitzindaria (heptano)	ona	talde bereizgarri nagusiaren atzizkia
en(o)	asegabetsunaren atzizkia	kloro	ordezkatzailen aurrizkia
di	aurrizki biderkatzailea	S E	estereo-deskribatzailea
2 4 5 6	lekutzaileak	()	inguratzaile markak

Aurrizki biderkatzaileak (2. Taula) egitura batean mota bereko zati bat baino gehiago ageri direnean erabiltzen dira. Aurrizki biderkatzaile motaren aukera, errepikatzen den zatiaren konplexutasunaren arabera kausitzen da – e.g. trikloro, baina tris(klorometil).

2. Taula: Aurrizki biderkatzaileak entitate simple eta konplexuetarako

Nº	Simple	Konplexua	Nº	Simple	Konplexua
2	di	bis	8	okta	oktakis
3	tri	tris	9	nona	nonakis
4	tetra	tetrakis	10	deka	dekakis
5	penta	pentakis	11	undeka	undekakis
6	hexa	hexakis	12	dodeka	dodekakis
7	hepta	heptakis	20	ikosa	ikosakis

3 IZEN SISTEMATIKOEN SORKUNTZA

Izen sistematiko baten eraketak hainbat urrats ditu, (aplikagarriak direnean) hurrengo hurrenkeran hartuak:

- Zehaztu zein den talde bereizgarri nagusia atzizki bezala izendatzeko (ikus 4. Atala).
- Egituraren osagaien artean, talde bereizgarri nagusiari atxikita dagoen konposatu aitzindaria zehaztu (ikus 5. eta 6. Atalak).
- Izendatu hidruo aitzindaria eta zehaztu asegabetsunak (5. Atala).
- Konbinatu hidruo aitzindariaren izena talde bereizgarri nagusiaren atzizkiarekin (4. Atala).
- Identifikatu ordezkatzailak eta dagokien aurrizkiak ordenatu hurrenkeran alfabetikoan.
- Aurrizki biderkatzaileak txertatu, aurretik ezarritako ordena aldatu gabe, eta lekutzaileak gehitu.
- Zehaztu zentro estereogenikoak eta bestelako unitate estereogenikoak, lotura bikoitzak bezalakoak, eta gehitu estereo-deskribatzaileak.

4 TALDE BEREIZGARRIAK – Atzizkiak eta aurrizkiak

Talde bereizgarri (edo funtzional) baten agerpena, konposatu aitzindariaren izenari atxikita dagoen aurrizki edo atzizki baten bidez adierazten da. Talde bereizgarri ohikoen izenak 3. Taulan daude, lehentasun hurrenkeran. Nagusitasun handiagokoa, talde bereizgarri nagusia, atzizki bezala adierazten da, bestelako talde guztiak aldiz aurrizki bezala adierazten dira. Ohartu nola izendatzeko helburuarekin, C-C lotura anizkoitzak ez direla talde bereizgarri bezala kontuan hartzen (5.4. Atala).

3. Taula Lehentasun ordena talde bereizgarrientzako

Mota	Formula*	Atzizkia	Aurrizkia
karboxilatoak	–COO [–] –(C)OO [–]	-karboxilato -oato	karboxilato
azido karboxilikoak	–COOH –(C)OOH	azido -karboxiliko azido -oiko	karboxi
esterrak	–COOR –(C)OOR	(R)** -karboxilato (R)** -oato	(R)oxikarbonil
azil haluroak	–COX –(C)OX	-karbonil haluro -oil haluro	halokarbonil
amidak	–CONH ₂ –(C)ONH ₂	-karboxamida -amida	karbamoil
nitriloak	–C≡N –(C)≡N	-karbonitrilo -nitrilo	ziano
aldehidoak	–CHO –(C)HO	-karbaldehido -al	formil oxo
zetonak	=O	-ona	oxo
alkoholak	–OH	-ol	hidroxi
tiolak	–SH	-tiol	sulfanil***
aminak	–NH ₂	-amina	amino
iminak	=NH	-imina	imino

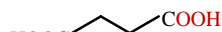
* Hemen –(C) karbono atomoak konposatu aitzindariaren izenean barne dagoela adierazten du.

** Hemen (R), R taldea aurrizkidun hitz banandu batez adierazten dela esan nahi du.

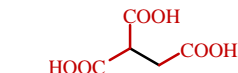
*** Oharra. “merkapt” hitza ez da onartua (baina jadanik erabilia da CAS-engatik).



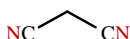
Atziki bezala izendatutako karbonodun taldeen kopuruaren eta hauen antolamenduaren arabera, karbono atomoa konposatu aitzindariaren atal bezala izenda daiteke (e.g. $-(C)OOH$, "azido -oiko") edo konposatu aitzindariari lotutako talde bezala har daiteke (e.g. $-COOH$, "azido karboxiliko").



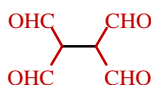
azido butanodioiko



azido etano-1,1,2-tricarboxiliko

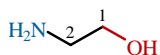


propanodinitrilo

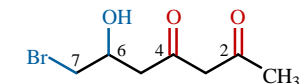


etano-1,1,2,2-tetrakarbaldehido

Konposatu aitzindari batean bestelako talde bereizgarriak aurrikien bidez, hurrenkera alfabetikoan adierazten dira (hemen **urdinez**, R alkil edo aril talde bat adierazten duela), eterrak ($-OR$), (**R**)oxi; sulfuroak ($-SR$), (**R**)sulfanil; bromuroak ($-Br$), **bromo**; kloruroak ($-Cl$), **cloro**; fluoruroak ($-F$), **fluoro**; ioduroak ($-I$), **yodo** (**iodo**); eta nitro taldeak ($-NO_2$), **nitro** barne.



2-aminoetan-1-ol



7-bromo-6-hidroxiheptano-2,4-diona

5 KONPOSATU AITZINDARIAK, HIDRURO AITZINDARIAK

Ordezkapen nomenklaturan konposatu aitzindari mota desberdinak erabiltzen dira. Talde bereizgarriak ez dituzten konposatu aitzindariak hidruro aitzindariak deitzen dira. Hidruro hauek linealak edo ziklikoak (eraztunak) diren arabera sailka daitezke, eta karbono edota heteroatomoak izan ditzakete. Konposatu aitzindari ziklikoak monoziklikoak edo zubidun poliziklikoak (bi atomo baino gehiago partekatzen dituzten eraztunak), polizikliko kondentsatuak (aldameneko bi atomo partekatzen dituzten eraztunak) edo polizikliko espiranikoak (atomo bakar bat partekatzen dituzten eraztunak) izan daitezke. Konposatu aitzindari konplexuagoak, fusioatutako zubidun sistemak, eraztun elkartetak, ziklofanoak, eta fullerenoak izaten dituzte. Konposatu aitzindariaren atomoen zenbaketa erregela propioen bidez esleitzen da. Hemendik aurrera, 7. Atalean azaldutako arauak erabiltzen dira.

5.1 Hidruro aitzindari aziklikoak

Karbono kate asean izenak (alkanoak) karbono atomoen kopurua adierazten duen zenbaki termino simple batez osatuta daude (2. Taula, "a" elidituarekin) "ano" atzikiarekin batera (ikusi 4. Taula), lehenengo lau alkanoen salbuespenarekin: metano, CH_4 ; etano, CH_3CH_3 ; propano, $CH_3CH_2CH_3$; butano, $CH_3[CH_2]_2CH_3$.

4. Taula Alkano lineal batzuen izenak

$CH_3[CH_2]_3CH_3$	$CH_3[CH_2]_7CH_3$	$CH_3[CH_2]_{18}CH_3$
pentano	nonano	ikosano
$CH_3[CH_2]_4CH_3$	$CH_3[CH_2]_{16}CH_3$	$CH_3[CH_2]_{20}CH_3$
hexano	oktadekano	dokosano

5.2 Hidruro aitzindari monoziklikoak

Hidrokarburu ase monoziklikoen (zikloalkanoen) izenak "ziklo" aurrikiaz eta dagokion alkanoaren izenez osatuta daude.



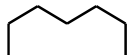
ziklopropano



ziklobutano



ziklohexano



ziklodekano

Zenbait izen ez-sistematiko mantendu dira eraztun arrunt batzuentzat, adibidez bentzenoa, eta hurrengoko heterozikloak.



bentzeno



piridina



piperidina



pirazina



furano

Heteroatomak dituzten eraztun monoziklikoen izen sistematikoak Hantzsch-Widman (HW) sistemaren arabera (3-tik 10-era atomoko eraztunak) edo ordezkoen nomenklaturaren bidez (eraztun handiagoak) eraikitzen dira.^{4,5} Sistema biek 5. Taulan erakusten diren "a" aurrikizkiak erabiltzen dituzte, non nagusitasuna jaisten den ezkerretik eskuinera lehenengo lerroan eta gero bigarren lerroa.

H-W sistemak nagusitasunean jaisten diren 5. Taulako "a" aurrikizkiak konbinatzen ditu amaierekin, zurtoinak (stems) deitua H-W sistematan, eraztunaren tamaina eta asetatsuna adierazten dituztenak (6. Taula).

5. Taula Aukeraturako "a" aurrikizkiak H-W eta ordezkapen sistemetarako

O	oxa	S	tia	N	aza	P	fosfa
As	arsa	Si	sil	Sn	estanna	B	bora

Lekutzaile egokiak gehitzen dira eraztunean ordezkatzaileen lekua deskribatzeko, eta bokal bat ondoren doanean "a" eliditzen da. Eratzunean 10 atomo baino gehiago badaude, ordezkoen nomenklatura erabiltzen da, non "a" aurrikizkiak zerrendatzen dira berriz nagusitasun ordenean jaisten, lekutzaileekin, izen aitzindariaren aurretik. Atomoen zenbaketa 7. Atalean azaltzen da.

6. Taula Amaierak Hantzsch-Widman sistematan

Eraztunaren tamaina	Asegabea	Asea
3	irino* / ireno	iridino / irano**
4	eto	etidino / etano**
5	ol	olidino / olano**
6	ino / ino / inino***	ano / inano / inano***
7	epino	

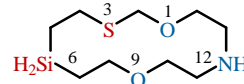
* N heteroatomo(k) baino ez duten eraztunak. ** N-rekin / N-gabeko heteroatomodun eraztunak. *** O, S / N, Si, Sn / P, As, B azkenik aipatutako heteroatomoa, hurrenez hurren.



1,3-dioxano



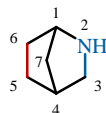
1,2-oxazol



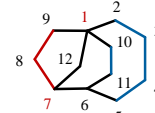
1,9-dioxo-3-tia-12-aza-6-silaziklotetradekano

5.3 Hidruro aitzindari poliziklikoak

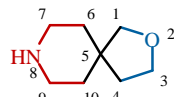
Zubidun sistema poliziklikoen izenak, karbono atomo kopuru berdina duen alkanoaren izenean oinarrituta daude, zeintzuk aurretik ziklo kopuruaren adierazle bat eta eraztun ezberdinen tainainak definitzen dituen zubi deskribatzailea dituzten; deskribatzaile honek zubi-buruak lotzen dituzten zubi bakoitzaren eskeletoa osatzen duten atomo kopurua ematen du eta zenbaki arabierren bidez aipatzen da beheranzko orden numerikoan, puntuz berezita eta kortxete artean. Zenbaketa zubi-buruan hasten da eta eraztunak inguratzen doa (handienetik txikienera). Ordezko nomenklatura (ikusi 5.2 Atala) erabiltzen da erlazionatutako heterozikloak izendatzeko.



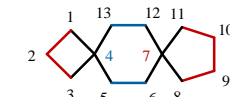
2-azabiziklo[2.2.1]heptano

triziklo[4.3.2.1⁷]dodekano

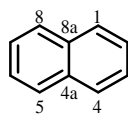
Sistema polizikliko espiranikoen izenak, zeinetan eraztunak atomo bakar bat partekatzen duten, espiro motako bilgune kopurua, zubi deskribatzailea, eta karbono atomo kopuru berdina duen alkanoaren izenaz osatzen dira. Berriz, erlazionatutako heterozikloak ordezko nomenklaturaren arabera izendatzen dira (ikusi 5.2 Atala).



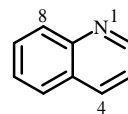
2-oxa-8-azaespiro[4.5]dekano

diespiro[3.2.4⁷.2⁴]tridekano

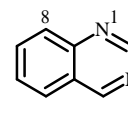
Fusioatutako polizikloak sistema ziklikoak dira non alboan dauden edozein eraztun bikoteak lotura bat partekatzen duten.



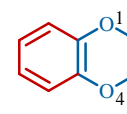
naftaleno



kinolina

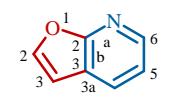


kinazolina

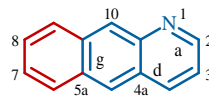


1,4-benzodioxino

Poliziklo fusioatuen nomenklatura sistematikoan, osagaien izenak konbinatzen dira eta fusio-deskribatzaile batek adierazten du osagaiak nola lotzen diren. Prozesu honek gida honen esparrutik kanpo dago (ikusi 5. erref. xehetasunetarako).



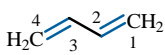
furo[2,3-b]piridina



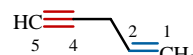
bentzo[6]kinolina

5.4 Asetatsuna eta asegabetasuna

Konposatu baten asegabetasun maila konposatu aitzindari asearekin konparatuta adieraz daiteke "ano" amaiera "eno" edo "ino" amaierekin ordezkatuz lotura bikoitza eta hirukoitza agerpena deskribatzen duena, hurrenez hurren, eta lekutzaileak gehituz hauen kokapena zehazteko.



buta-1,3-dieno

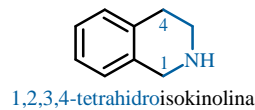
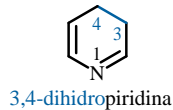


pent-1-en-4-ino

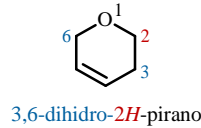
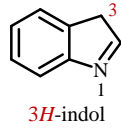
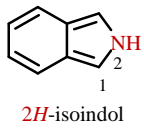


ziklohexa-1,3-dieno

Hidruro asegabe aitzindari hidrogenoaren gehikuntza "hidro" aurrizkiaren txertatzearekin adierazten da, berriz ere lekutzaileekin non gertatzen den zehazteko.

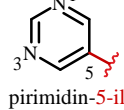
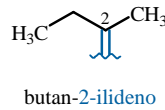
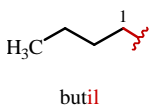


Hidruro asegabe aitzindari batzuentzat, posizio aseak zehazten dira adierazitako hidrogeno (*indicated hydrogen*) konbentzioa erabiliz.



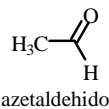
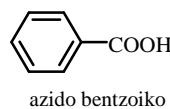
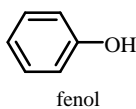
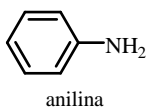
5.5 Hidruro aitzindarietatik deribatutako talde ordezkatzailak

Hidruro aitzindari batetik deribatutako talde batek beste konposatu aitzindari baten ordezkatzaila denean, ordezkatzailaren izena "il" edo "iliden" atzizkien gehikuntzaz sortzen da, loturaren kokapena adierazten duten dagozkien lekutzaileekin. "ilo" edo "ilideno" atzizkiek adierazten duten loturaren kokapena nagusitasuna dute edozein talde bereizgarri gaitetik (ikus 4. Atala, 3. Taula).



5.6 Aitzindari funtzionalak

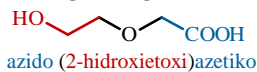
Hidruro aitzindari baten eta talde funtzional baten konbinazioak konposatu aitzindari funtzionala eman dezake entitate bakar bat bezala izendatzen dena. Honelako izenak izen sistematiko bezala erabiltzen dira soilik konposatu aitzindaria eta talde bereizgarri nagusia adierazten dutenean, e.g. 4-kloroanilina, baina azido 4-aminobentzoikoa (ez 4-karboxianilina, ez azido anilina-4-karboxilikoa).



6 KONPOSATU AITZINDARIEN NAGUSITASUNA

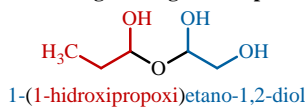
Izen sistematikoa konposatu aitzindari nagusienaren izenean oinarritzen da, hurrengo irizpideak jarraituz aukeratzen dena azpian adierazitako eta 1. Irudian erakusten den ordenean, erabakia hartu arte. Irizpide guztiak ikusteko 8. erreferentziara jo. Beheko adibideetan, konposatu aitzindari nagusia urdinez adierazten da, eta funtsezko arrazoa alboko testuan.

a. Talde bereizgarri nagusia du



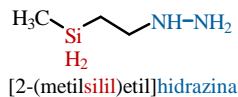
azidoak lehenasuna du alkoholarekiko

b. Talde bereizgarri nagusien kopuru maximoa



Bi talde bereizgarri konposatu aitzindariak lehenasuna du

c. Konposatu aitzindaria nagusitasuna duen elementuan oinarrituta (N, P, Si, B, O, S, C)



hidrazinak lehenasuna du silanoarekin alderatuz (N, Si baino lehen)

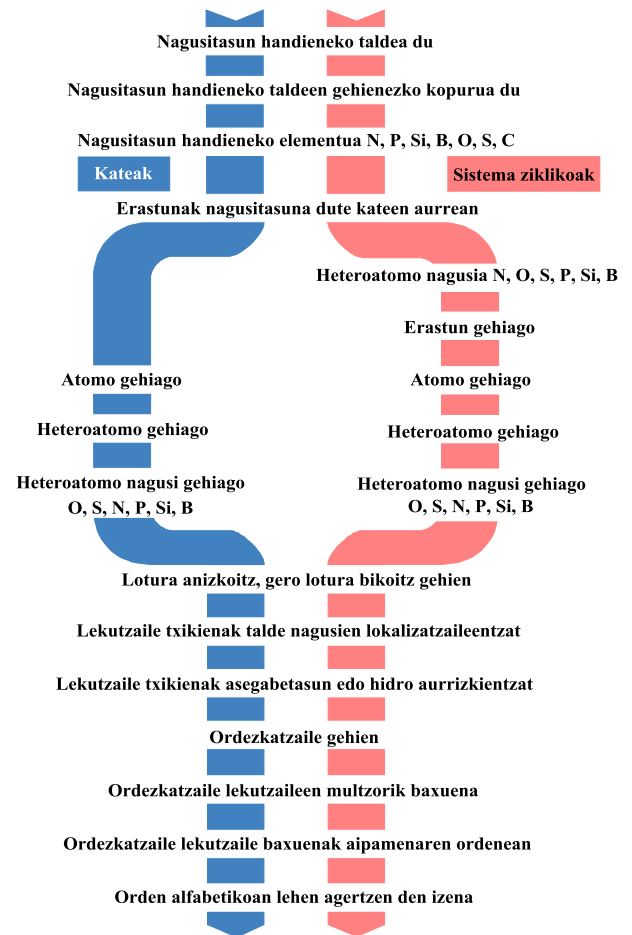
d. Erastunek nagusitasuna dute kateen aurrean, elementu berdinez osatuta badaude.



Ziklobutanoak lehenasuna du pentanoarekiko

1 Oharra: Irizpide honen ondoren, erastunak bakarrik edo kateak bakarrik baino ez dira geratzen hurrengo aukera hartzeko.

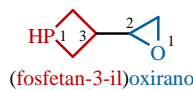
2 Oharra: Lehenagoko aholkuetan, lehenasuna atomo kopuruaren arabera esleitzen zen.



1. Irudia Konposatu aitzindari nagusia aukeratzeko irizpideak

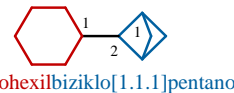
e. Sistema ziklikoentzako irizpideak

e.1. Heteroatomo nagusia du, hurrengo hurrenkeran N, O, S, P, Si, B.



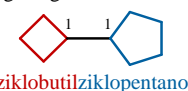
O-erastunak lehenasuna du P-erastunarekiko

e.2. Erastun kopuru handiagoa du



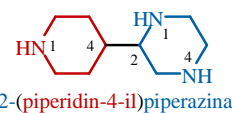
bizikloak lehenasuna du monozikloarekiko

e.3. Atomo gehiago ditu



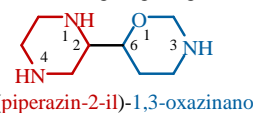
ziklopentanoak lehenasuna du ziklobutanoarekiko

e.4. Heteroatomo gehiago ditu



piperazinak, bi heteroatomo dituela, lehenasuna du piperidinarekiko

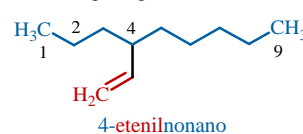
e.5. Heteroatomo nagusi gehiago ditu



oxazinanoak, O N dituela, lehenasuna du bi N atomo dituen piperazinarekiko

f. Kateentzako irizpideak

f.1. Atomo gehiago ditu

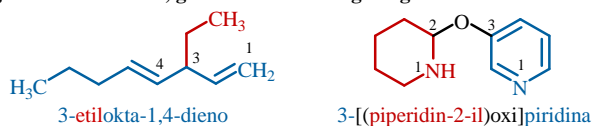


bederatzi atomodun kateak lehenasuna du zortzi atomodun katearekiko (lotura bikoitz gutxiago baditu ere)

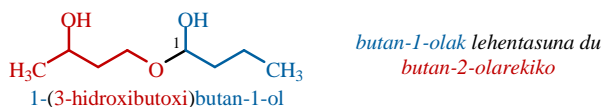
Oharra: Lehenagoko aholkuetan, asegabetasunak zuen lehenasuna katearen luzarekiko.

Hurrengo irizpideak erabiliak dira bai kateetan bai eraztunetan:

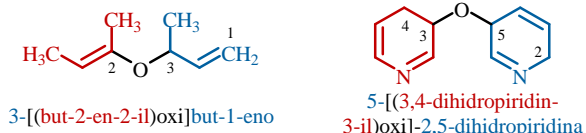
g. Lotura anizkoitz, gero lotura bikoitz gehiago dituen



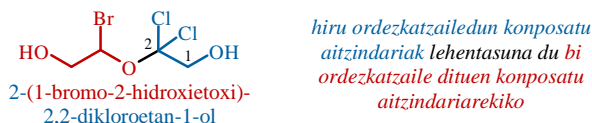
h. Lekutzaile txikiak nagusitasun handieneko taldeentzat



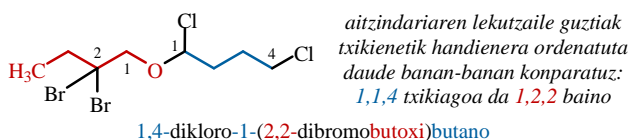
i. Lekutzaile txikiak asegabetasun edo hidro aurrizkientzat



j. Ordezkatzaile gehien dituen



k. Ordezkatzaileen lekutzaile multzorik baxuena du



Oharra: Ez 2,2-dibromo-1-(1,4-diklorobutoxi)butano

l. Ordezkatzaileen lekutzaile baxuenak aipamenaren ordenean



Oharra: Ez 2-bromo-3-(2-bromo-1-kloroetil)-1-klorohexano

m. Orden alfabetikoan lehenen agertzen den izena

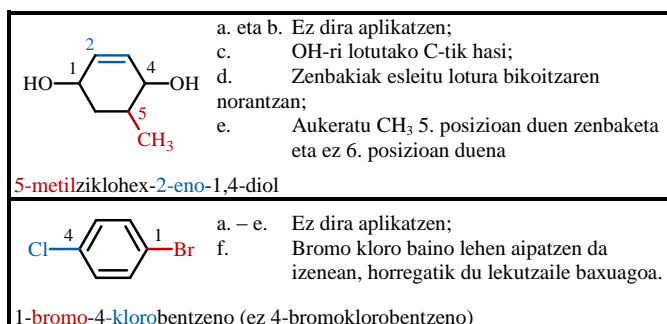


Oharra: Ez 1-(2-bromoetoxi)-2-kloroetano

7 KONPOSATU AITZINDARIEN ZENBAKETA

Konposatu aitzindariaren zenbaketa konposatu motaren arabera zehazten da, eta ondoren lekutzaile multzo posible guztiak kontuan hartuta, hurrengo irizpideak ordenean aplikatuz:

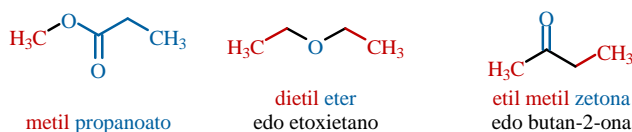
- Lekutzaile baxuenak heteroatomoentzako;
- Lekutzaile baxuena(k) adierazitako hidrogenoarentzako;
- Lekutzaile baxuena(k) talde bereizgarri nagusientzat;
- Lekutzaile baxuenak "eno", "ino" eta "hidro" aurrizkientzat;
- Lekutzaile baxuenak aurrizki bezala aipatutako ordezkatzaile multzoarentzat;
- Lekutzaile baxuenak ordezkatzaileentzat aipatutako ordenean.



Zenbaketa zuzena ezinbestekoa da, lekutzaile oker batek ezinezkoa egiten dio izenaren irakurleari egitura zuzena aurkitzea.

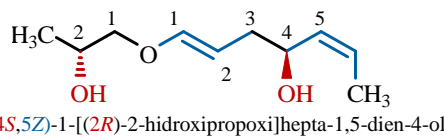
8 KLASE FUNTZIONALEN NOMENKLATURA

Klase funtzionalen izenak (lehen erradikofuntzionalak deituak) hobetsiak dira ester eta azil haluroentzat. Beste konposatu klaseentzat, (e.g. eterrak, zetanak, sulfoxidoak eta sulfonak) oraindik ere erabiltzen dira klase funtzionalen izenak, hala ere, ordezkapen izenak hobesten dira. Klase funtzionalen izenak alfabetikoki ordenatutako ordezkatzaile izen batez edo gehiagoz osatuta daude, eta jarraian konposatuaren klasearen izena (hutsune batez bananduak behar denean). Beraz, CH₃C(O)O-CH₃ metil azetato izendatzen da, ClCH₂C(O)O-CH₃ metil kloroazetato da, CH₃C(O)-Cl azetil kloruro da, C₆H₅C(O)-Br benzoiil bromuro, eta (H₃C)₂SO₂ dimetil sulfona deitzen da.



9 ESTEREOISOMEROEN KONFIGURAZIOA ZEHAZTEN

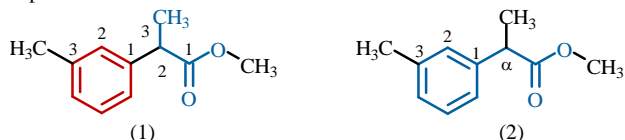
Estereoisomeroak elkar desberdintzen dira izenean aipatutako estereo-deskribatzaileen bidez eta esleitura Cahn-Ingold-Prelog (CIP) arauen arabera.^{9,10} Deskribatzaile arruntenak zentro estereogeniko tetraedrikoen konfigurazio absolutua deskribatzen dutenak dira (*R/S*) eta lotura bikoitzen konfigurazioa zehazten dutenak (*E/Z*). Lekutzaileak gehitzen dira zentro estereogenikoaren kokapena definitzeko eta deskribatzaile talde osoa parentesi artean doa.



Beste estereo-deskribatzaileak (*cis/trans*, *M/P*, *C/A*, adibidez) kasu berezietan erabiltzen dira. Etzan gabeko deskriptoreak α/β eta D/L (maiuskula txikiak) normalean produktu natural, aminoazido eta karbohidratoekin soilik erabiltzen dira.

10 CHEMICAL ABSTRACTS SERVICE IZENAK (CAS)

CAS-ek argitalpenetik bildutako substantzia kimikoen erregistroa mantentzen du.¹¹ CAS sisteman, IUPAC antzeko metodo batez izendatzen dira konposatuak, baina ez berdina. Ezberdintasun nabarmenena "CAS Index Names"-en erabileran dago, zeinetan indizeak, izen kimikoen indize alfabetikoak sortzeko alderantzizko orden berezi batean aipatzen dira. CAS-ek elkarketa nomenklatura erabiltzen du, zeinetan konposatu aitzindariak konbinatzen dira konposatu aitzindari berri handiago bat egiteko. Beheko adibidean, konposatu aitzindariaren elkartutako izena azido bentzenoazetikoa da (dagokion ordezkapen izena: azido fenilazetiko), berriz IUPAC-ek gomendatutako ordezkapen izena adibide honetarako azido propanoiko konposatu aitzindariaren kate luzeenean oinarritzen da.



IUPAC izena: metil 2-(3-metilfenil)propanoato (1)
CA izena: metil α ,3-dimetilbenzenoazetato (2)
CA Ingeleses methyl α ,3-dimethylbenzeneacetate (2)
Index inverted: benzeneacetic acid, α ,3-dimethyl-, methyl ester

Beste desberdintasunak lekutzaile eta estereo-deskribatzaileen posizioak dira, baita nomenklatura espezifikoko prozedura batzuk ere.

Oharra: beste hizkuntzen itzulpenetan nomenklatura mota hau ez eraldatzea gomendatzen da, sistemaren jatorrizko balioa gal ez dadin.

11 IRUDIKAPEN GRAFIKOKA

Konposatu kimiko organikoen egiturak orokorrean zig-zag konbentzioaren arabera irudikatzen dira, aurretik erakutsi den arabera.¹² Konbentzio honetan, karbono atomo guztiak (eta hauei lotutako hidrogeno atomoak) gutxienez hidrogenoak ez diren beste bi atomoen lotuta daudenean, loturak adierazten duten bi lerroen bidegurutze batez irudikatzen dira. Heteroatomoen lotutako hidrogenoak irudikatuta ageri behar dira. Honelako irudikapen grafikoetan, lerroen mutur bakoitzak, angelu bakoitzak, eta bidegurutze bakoitzak hidrogenoz asetako karbono atomo bat adierazten du. Konbentzio bereziak erabiltzen dira zentro estereogenikoen eta lotura bikoitzen konfigurazioa irudikatzeko.¹³

⁹ R. S. Cahn, C. Ingold, V. Prelog, Specification of Molecular Chirality, *Angew. Chem.* **78**, 413–447 (1966); *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* **5**, 385–415 eta 511 (1966).

¹⁰ V. Prelog; G. Helmchen, Basic Principles of the CIP-System and Proposals for a Revision, *Angew. Chem.* **94**, 614–631 (1982); *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* **21**, 567–583 (1982).

¹¹ Chemical Abstracts Service, <https://www.cas.org>.

¹² J. Brecher *et al.*, Graphical representation standards for chemical structure diagrams, *Pure Appl. Chem.* **80**(2), 277–410 (2008).

¹³ J. Brecher *et al.*, Graphical representation of stereochemical configuration, *Pure Appl. Chem.* **78**(10), 1897–1970 (2006).

