

TARTU ÜLIKOOL
TEADUSKOOL



ORGAANILISTE ÜHENDITE NOMENKLATUUR

Heiki Timotheus

Õppevahend TK õpilastele
Tartu 2015

Orgaaniliste ühendite nomenklatuur

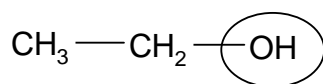
Orgaaniliste ühendite suure arvu ja keeruliste struktuuride tõttu on väga oluline osata ühendeid õigesti ja **ühemõtteliselt** nimetada. Sellest pole midagi paha, kui ühele ja samale ühendile vastab mitu erinevat korrektset nimetust, sest käigus on olnud ja on ka praegu mitmeid erinevaid nomenklatuurisüsteeme. Tähtis on aga, et ühele nimetusele vastaks üks ja ainult üks struktuur, muidu võib tekkida suur segadus.

Käesolevaga püüamegi anda Rahvusvahelise Puhta ja Rakenduskeemia Liidu (International Union of Pure and Applied Chemistry, lüh. IUPAC) kõige uuemate, 1993.a. avaldatud nomenklaturieeskirjade mõningad põhialused. Täpsemat infot nende kohta saab erialasest kirjandusest [1].

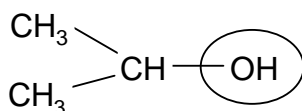
Nimetusi on mugavam kasutada, kui nad on võimalikult lihtsad. Kõige lihtsamad ongi sellised nimetused, mis on ühe või teise ühendi jaoks ajalooliselt välja kujunenud (äädikhape, toluen, püridiin, glükoos jne.). Selliseid nimetusi kutsutakse **triviaalseteks**. Kahjuks ei peegelda need märkimisväärselt ühendi struktuuri ennast. 1993.a. IUPAC-i reeglid lubavad neid siiski laialdaselt kasutada nii omaette kui ka funktsionaalklassi või süstemaatiliste substitutiivsete nimetuste juures (vt. allpool). Lubatud triviaal- ja poolsüstemaatilised nimetused süsivesinike, heterotsüklike, alkoholide, fenoolide, karbonüülühendite, karboksüülhapete jt. ühendite ja nendest tuletatud asendusrühmade jaoks on toodud IUPAC-i reeglites [1].

Nomenklatuurisüsteemi, mis püüab nimetuses rohkem peegeldada struktuuri ning võtab nimetuse aluseks ühendi kuuluvuse ühte või teise orgaaniliste ühendite klassi (funktsionaalse rühma järgi) nimetataksegi **funktsionaal-klassi** nomenklatuuriks. Seda kasutatakse eriti alkoholide, halogeenderivaatide, eetrite, amiinide ja karbonüülühendite puhul. Nimetuse aluse (tavaliselt funktsionaalse rühma) juures olevad süsivesinikrühmad nimetatakse -üül lõpuga nagu tavaliselt.

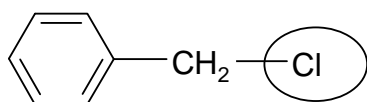
Näited:



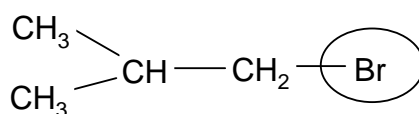
etüülalkohol



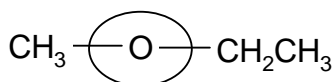
isopropüülalkohol



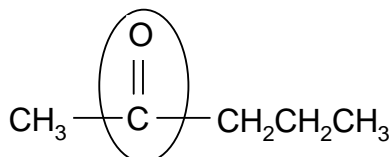
bensüülkloriid



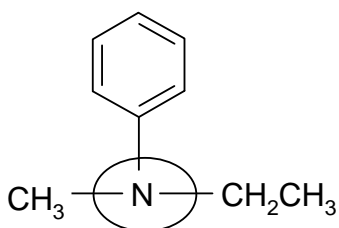
isobutüülbromiid



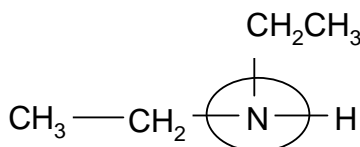
metüületüüleeter



metüülpropüülketoon



metüületüülfenüülamiin
(N-metüül-N-etüülamiin)



dietüülamiin

Aldehüüdide puhul kasutatakse triviaalnimetusi, mis vastavad aldehüüdi oksüdeerumisel tekkiva karboksüülhappe triviaalnimetusele.

Näited

HCHO
formaldehüüd e. sipelghappealdehüüd

HCOOH
sipelghape

CH₃CHO
atsetaldehüüd e. äädikhappe aldehüüd

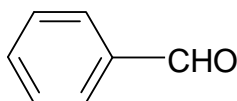
CH₃COOH
äädikhape

CH₃CH₂CHO
propioonaldehüüd

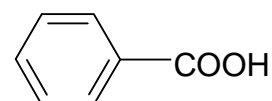
CH₃CH₂COOH
propioonhape

CH₃CH₂CH₂CHO
butüüraldehüüd e. võihappe aldehüüd
võihape

CH₃CH₂CH₂COOH
butüürhape e.



bensaldehüüd



bensoehape

Estreid nimetatakse triviaalnimetusega analoogselt sooladega, või karboksüülhappe nimetuse järgi. Karboksüülhappe triviaalnimetuse järgi nimetatakse ka amiide ja nitrile.

Näited

HCOOCH₃
metüülformiaat e.
sipelghappe metüülester

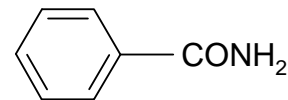
CH₃COOCH₂CH₃
etüülatsetaat e.
äädikhappe etüülester



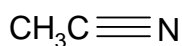
bensüülbensoaat e.
bensoehappe bensüülester



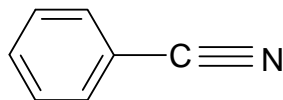
atseetamiid



bensamiid

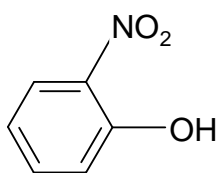


atsetonitriil

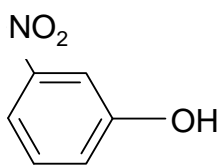


bensonitriil

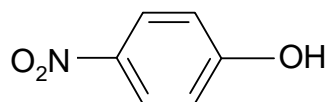
Kahe asendusrühma puhul benseeni tuumas on tähistatud asendeid 1,2; 1,3 ja 1,4 vastavalt eesliidetega orto (lüh. o-), meta (m-) ja para (p-):



o-nitrofenool



m-nitrofenool



p-nitrofenool

Kolme ja enama asendaja puhul ei ole selline tähistus enam ühetähenduslik, sellepärast kasutatakse uuemal ajal peamiselt asendite numbrilist tähistusviisi.

Kõige rangemalt on struktuuriga seotud **substitutiivne** nomenklatuur, mille puhul valitakse nimetuse aluseks struktuuri kõige olulisem osa - **tüviühend**. Selleks on enamasti süsivesinik (lahtise ahelaga või tsükline), aga ka heterotsükkel. Tüviühendi vesinikke võib asendada mitmesuguste asendusrühmadega (süsivesinikrühmad ja funktsionaalsed rühmad). Asendusrühmad ning kordsed sidemed tähistatakse ees-, järel- või siseliidetega. Kõik tüviühendi süsinikud nummerdatakse ning nimetuses **vahetult iga liite ees** (mitte nimetuse ees, nagu varem) tähistatakse liitele vastava asendusrühma või kordse sideme asukoht numbriga. Nummerdamist alustatakse tüviühendi ahela otsas asuvast kõige tähtsamast asendusrühmast (näiteks -CHO või -COOH). Tüviahelaks valitakse kas kõige pikem süsinikahel või selline ahel, milles on kõige rohkem kordseid (C=C ja C≡C) sidemeid.

Erinevalt varasematest reeglitest lubavad IUPAC-i 1993.a. nomenklatuuri reeglid nimetada **radikaalideks** ainult **paardumata elektroniga osakesi** (näit. Cl· ja H· jt.); molekuli osa R- nimetatakse üldnimetusega süsivesinikrühmaks (asendusrühmaks, mitte radikaaliks, nagu varem). Tüviühendina eelistatakse tavaliselt heterotsükli karbotsükli ja karbotsükli lahtise ahelaga süsivesinikule. Kui aga nimetus läheb selle põhimõtte rangel rakendamisel liiga keeruliseks ja

kohmakaks, võib tsükleid vaadelda asendusrühmadena, mitte tüviühenditena (vt. näiteid allpool).

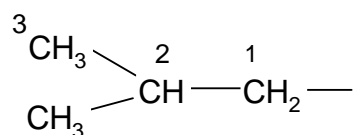
Üldreeglina püütakse asendusrühmi nummerdada nii, et nende numbrid oleksid minimaalsed. Kaksiksidemele antakse väiksem number kui kolmiksidemele. Keerulisemate tsükliliste süsteemide nummerdamiseks on vastavad eeskirjad [1]. Ühe heteroaatomiga heterotsükli puhul alustatakse nummerdamist alati heteroaatomist, benseenituuma puhul kõige sagedamini -OH, -CHO või -COOH rühmast.

Süsteematises substitutiivses nomenklatuuris tähistatakse eesliidetega järgmisi tähtsamaid rühmi:

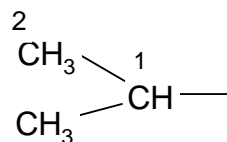
| | | | |
|------|---|--------------------|---------|
| -Cl | kloro | -OCH ₃ | metoksü |
| -Br | bromo | -NH ₂ | amino |
| -I | jodo | -NO ₂ | nitro |
| -OH | hüdoksü | -COCH ₃ | etanoül |
| -C≡N | tsüano (järelliitena nitril või tsüaniid) | | |

Tähtsamad süsivesinikrühmad kannavad järgmisi nimetusi (eesliidetena):

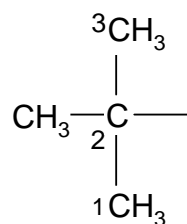
| | |
|---|---------|
| CH ₃ - | metüül |
| CH ₃ CH ₂ - | etüül |
| CH ₃ CH ₂ CH ₂ - | propüül |



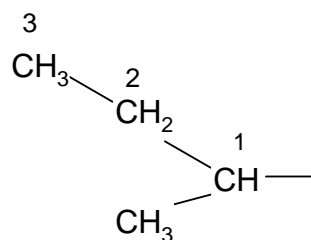
2-metüülpropüül e. isobutüül



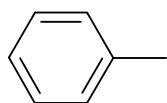
1-metüületüül e. isopropüül



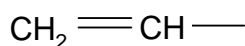
2-metüülpropan-2-üül e. tert-butüül



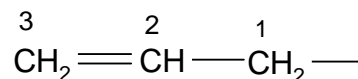
1-metüülpropüül e. sec-butüül e. butaan-2-üül (kui nummerdamist alustatakse ahela otsast)



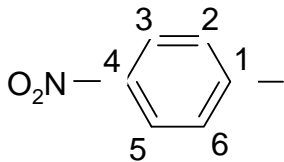
fenüül



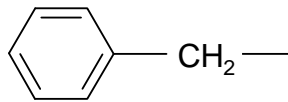
etenüül e. vinüül



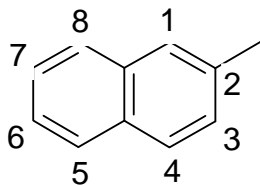
prop-2-een-1-üül e. allüül



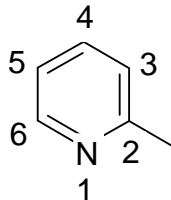
4-nitrofenüül



fenüülmetüül e. bensüül



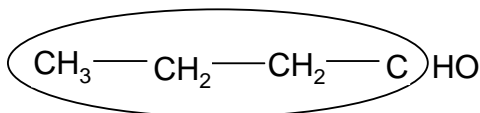
naftaleen-2-üül



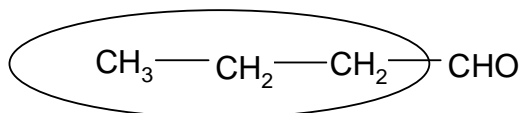
püridiin-2-üül

Nagu näete, tähistatakse numbriga vajaduse korral ka vaba valentsi (sideme) asukoht (liite -üül ees).

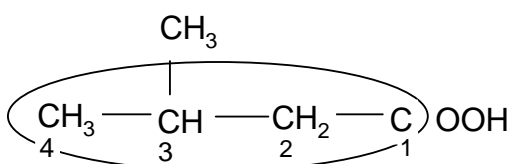
Süsinikahela otsas olevate süsinikku sisaldavate funktsionaalsete rühmade puhul kasutatakse peamiselt järelliiteid. Nimetus ja numeratsioon on erinev, olenevalt sellest, kas asendusrühma C aatom arvatakse tüviühendi koostisse või mitte:



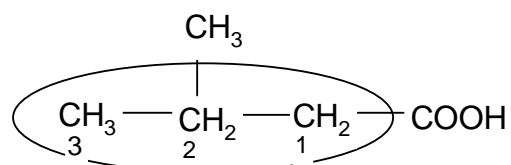
butanaal



propaankarbaldehüüd

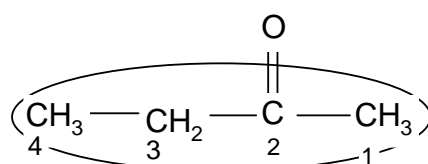


3-metüülbutaanhape



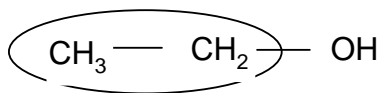
2-metüülpropaankarboksüülhape

Ketorühma märgitakse kas eesliitega okso- või järelliitega -oon:

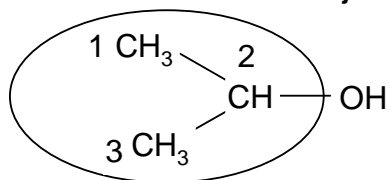


2-oksobutaan e. butaan-2-oon

Peale eesliite hüdroksü- saab alkohole nimetada ka järelliite -ool abil:

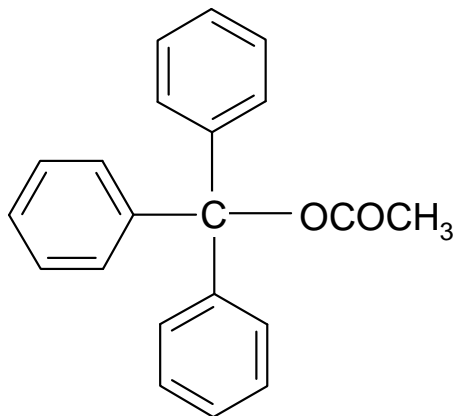


etanool



propan-2-ool (mitte isopropanool)

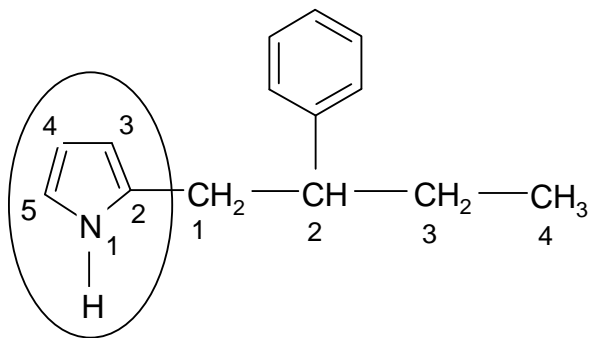
Estreid nimetatakse süstemaatilise nomenklatuuri järgi alkoholi süsivesinikrühma ja karboksüülhappe nimetuse alusel:



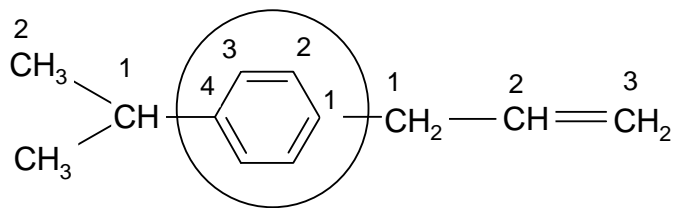
etüülpropanaat

trifenüülmetüületanaat

Süstemaatiline substitutiivne nomenklatuur on üks mugavamaid C=C ja C≡C sidemeid sisaldavate ühendite nimetamisel. Veel näiteid süstemaatiliste substitutiivsete nimetuste kohta:

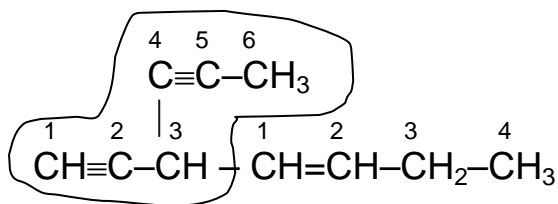


2-(2-fenüülbutüül)pürrool
metüületüül)benseen

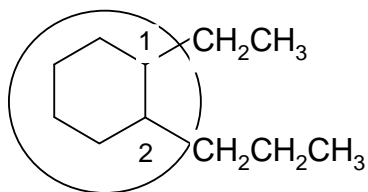


1-(prop-2-een-1-üül)-4-(1-

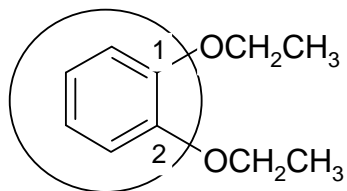
e. 1-allüül-4-isopropüülbenseen



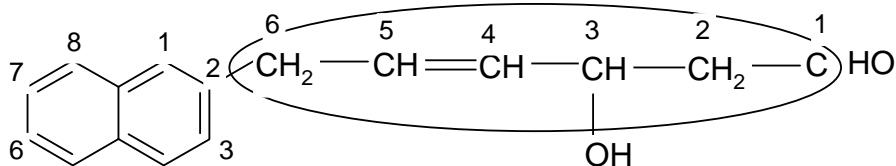
3 -(but -1-een-1-üül)heksa -1,4-diüün



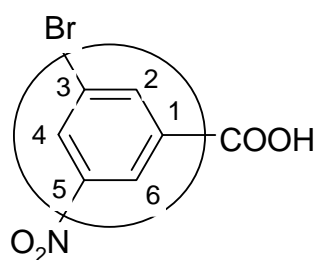
1-etüül-2-propüül-tsükloheksaan



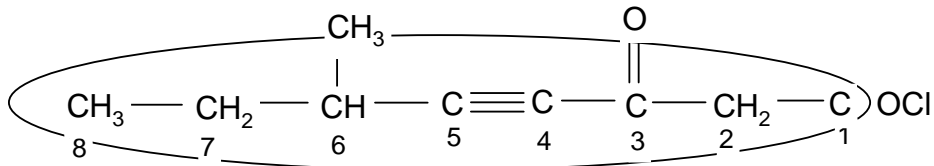
1,2-dietoksübenseen



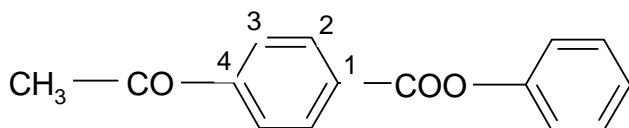
3-hüdoksü-6-(naftaleen-2-üül)heks-4-eenaal



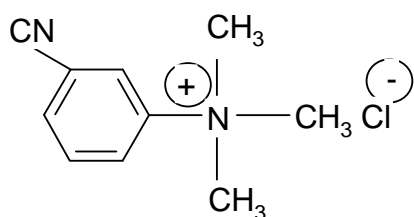
3-bromo-5-nitrobenseenkarboksüülhape e.
3-bromo-5-nitrobensoehape



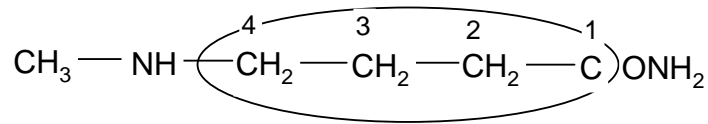
6-metüül-3-okso-okt-4-üünoüülkloriid



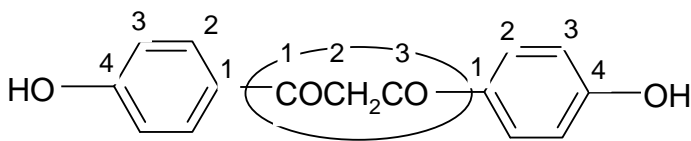
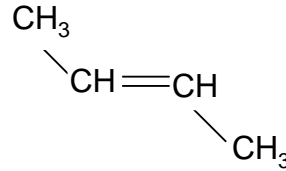
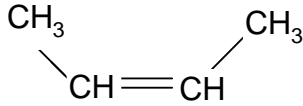
fenüül-4-etanoüülbenseenkarboksülaat e. ~ bensoaat



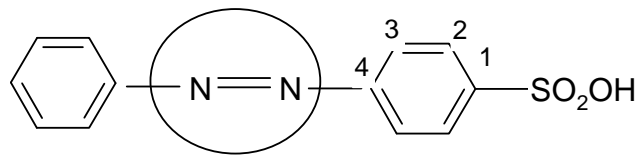
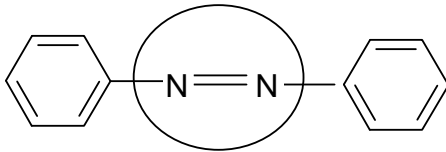
N,N,N-trimetüül-3-tsüanofenüülammooniumkloriid



4-(N-metüülamino)butaanamiid

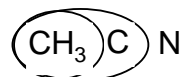
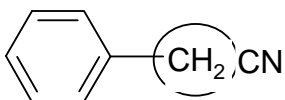


1,3-di(4-hüdoksüfenüül)-propaan-1,3-dioon



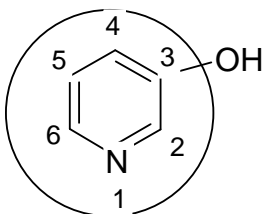
difenüüldiasseen
(fenüüldiasenüül)benseensulfoonhape
(varem asobenseen)

4-

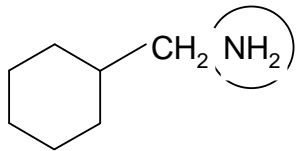


fenüül-tsüanometaan

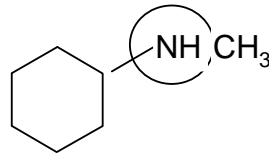
etaannitriil e. atsetonitriil e.
tsüanometaan e. metüültsüaniid



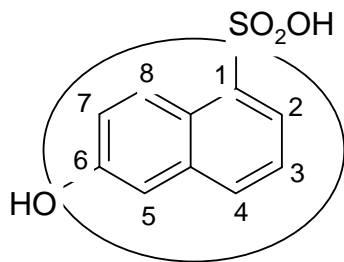
3-hüdoksüpüridiin



tsükloheksüülmetüülamiin



N-metüül-tsükloheksüülamiin



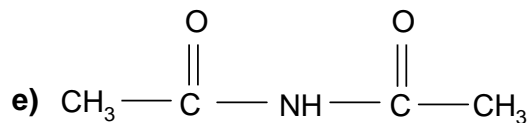
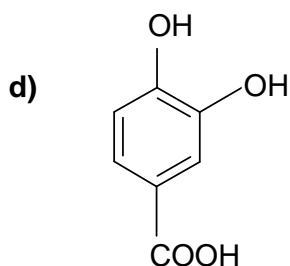
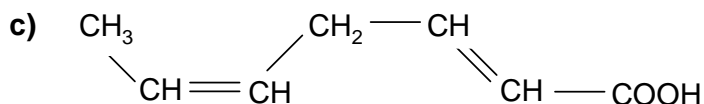
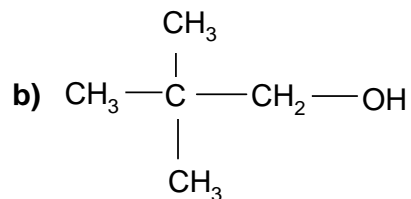
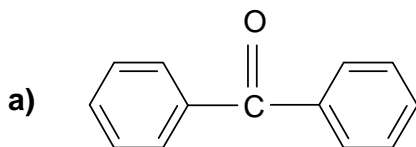
6-hüdoksünaftaleen-1-sulfoonhape

Kirjandus:

1. Inglise-eesti-vene keemia sõnaraamat. Eesti Entsüklopeediakirjastus. Tallinn 1998, lk 55-108. (vt. eriti nimetuse moodustamise juhendit (lk.78) ja nimetuse tõlgendamist (lk. 101.)).
2. Keemianomenklatuur. Eesti Entsüklopeediakirjastus. Tallinn. 2000.

NÄIDISÜLESANDED

1. Leida nimetus.



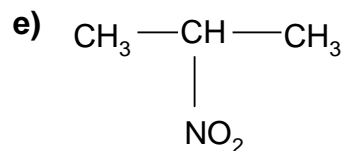
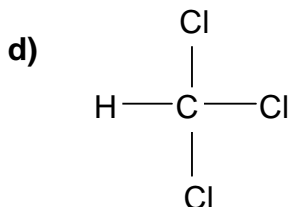
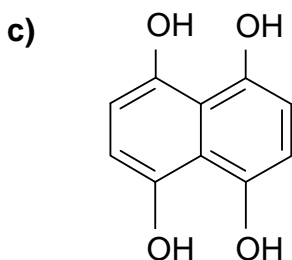
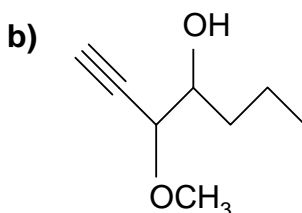
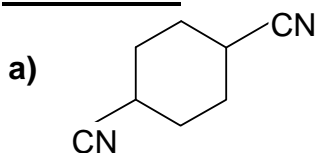
Vastused:

- a) difenüülketoon, difenüülmetanoon
- b) 2,2-dimetüülpropaan-1-ool
- c) hepta-2,5-dieenhape; hekso-1,4-dieenkarboksüülhape
- d) 3,4-dihüdrosübensoehape, 3,4-dihüdrosübenseenkarboksüülhape
- e) diatsetüülamiin, dietanoüülamiin

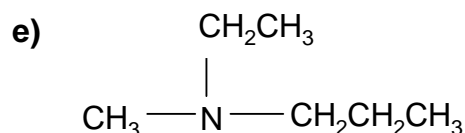
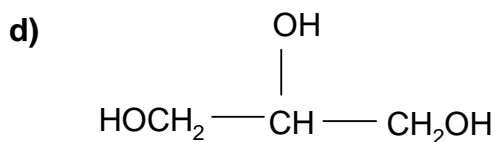
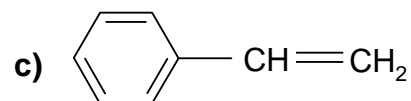
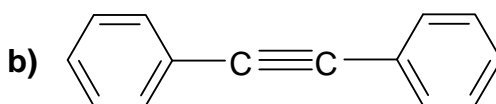
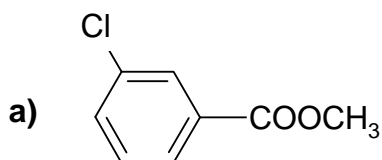
2. Leida nimetusele vastav struktuur.

- a) 1,4 – ditsüanotsükloheksaan
- b) 3 – metoksü – 4 – hüdroksühept – 1 – üün
- c) 1,4,5,8 – tetrahüdrosünaftaleen
- d) triklorometaan
- e) 2 – nitropropaan

Vastused:



3. Leida nimetus.

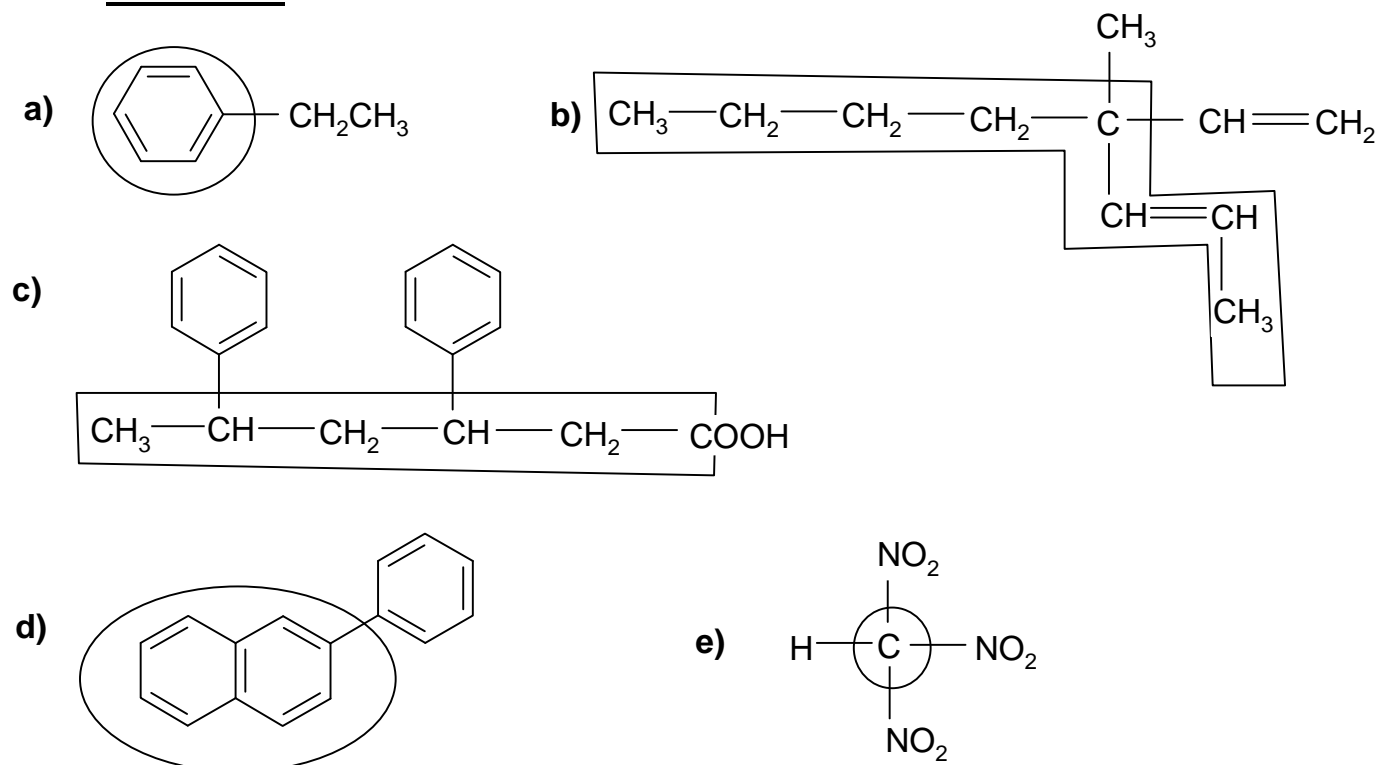


Vastused:

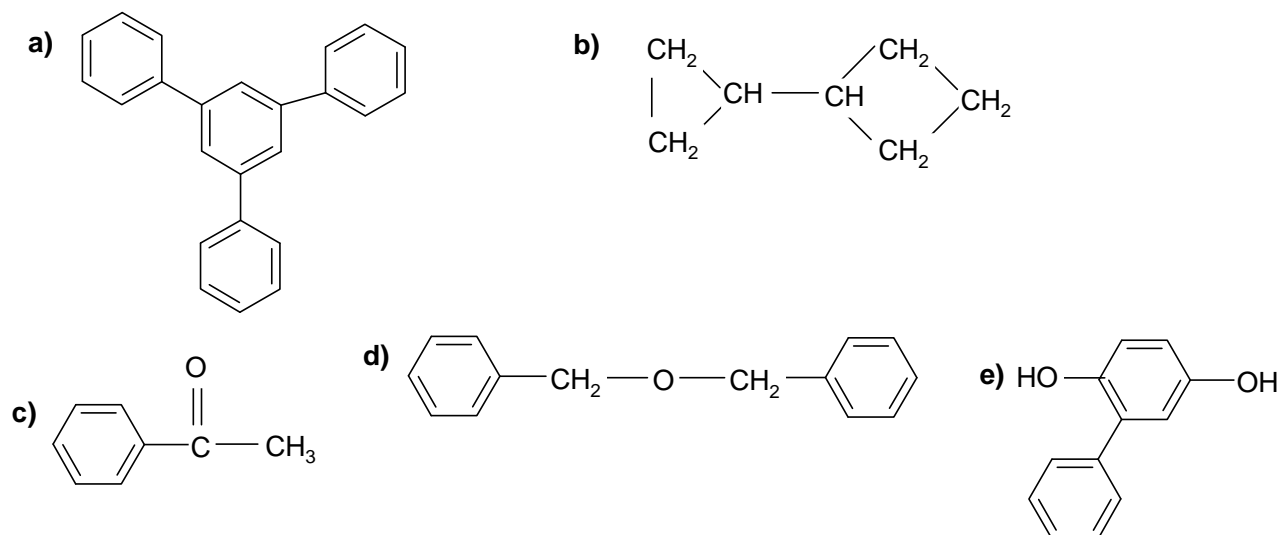
- a) metüül-3-klorobensoaat, 3-klorobensoehappe metüülester
- b) 1,2-difenüületüün
- c) etenüülbenseen, vinüülbenseen, stüreen
- d) propaan-1,2,3 –triool, glütserool
- e) etüülmetüülpropüülamiin

4. Leida tüviühend

Vastused:



5. Leida nimetus ja ühendi klass(id).



Vastused:

- a) 1,3,5-trifenüülbenseen (areen)
- b) tsüklopropüülsüklobutaan (tsükloalkaan)
- c) metüülfenüülketoon, atsetofenoon (ketoon, areen);
- d) dibensüüleeter, di(fenüülmetüül)eeter (eeter; areen);
- e) 1,4-dihüdrosü-2-fenüülbenseen (fenool, areen)