

NOMENCLATURA DE QUÍMICA ORGÀNICA

SECCIÓ H: COMPOSTS MODIFICATS ISOTÒPICAMENT

per

JOSEFINA CASAS I BRUGULAT I ÀNGEL MESSEGUER I PEYPOCH

Versió catalana de l'edició anglesa
(Recomanacions aprovades del 1978)

INTRODUCCIÓ

Aquestes regles posen a l'abast un sistema general de nomenclatura per a composts orgànics que presenten una composició de núclids isotòpics (ref. 1)* diferent de la que ocorre en la natura †. Hom pot trobar a l'apèndix (pag. 34), exemples comparatius de l'aplicació d'aquestes regles.

Hi ha un altre sistema general que s'empra per descriure composts modificats isotòpicament. Aquest sistema es basa en una extensió dels criteris proposats per Boughton (ref. 3) per designar composts que contenen isòtops d'hidrogen i que s'utilitza principalment en el sistema de nomenclatura d'índex del «Chemical Abstracts Service». Per a una descripció del seu ús habitual, vegeu la ref. 4.

El sistema codificat per les regles en aquí establertes té prou abast com per reconèixer diversos tipus de modificació isotòpica i per això fou escollit davant del sistema basat en els criteris de Boughton.

H-1. SÍMBOLS, DEFINICIONS I FÓRMULES

Regla H-1.1. Símbols

1.11- Símbols de núclids. El símbol per denotar un núclid a la fórmula o al nom d'un compost modificat isotòpicament, consta del símbol atòmic de

* Les referències per a la secció H es troben a la pag. 35.

† Per a una discussió del significat de «composició que ocorre en la natura», vegeu la ref. 2.
En cada context on la precisió ho requereixi, caldrà fer constar la composició nuclídica natural emprada.

l'element i d'un numeral aràbic col·locat com a superíndex a l'esquerra del símbol atòmic, el qual indica el nombre de massa del núclid (ref. 5a).

1.12- Símbols atòmics. Els símbols atòmics emprats en el símbol del núclid són aquells indicats a les Regles de Nomenclatura Inorgànica de la IUPAC (ref. 5b). Com és costum a la nomenclatura química orgànica (cf. amb la regla C-814.4, pag. 255, ref. 6), en el símbol del núclid el símbol atòmic s'imprimeix en tipus romà mentre que símbols atòmics en cursiva es reserven per als localitzadors de lletres.

Nota: Per als isòtops de l'hidrogen proti, deuteri i triti, s'empren els símbols de núclid ^1H , ^2H i ^3H , respectivament. Es poden utilitzar els símbols D i T per a ^2H i ^3H , respectivament, però no quan altres núclids modificadors s'hi trobin presents, per tal d'evitar problemes en l'ordenació alfabètica dels símbols dels núclids en el descriptor isotòpic. Malgrat que els símbols *d* i *t* han estat i són encara emprats en comptes de ^2H i ^3H en noms formats d'acord amb el sistema de Broughton (vegeu la Introducció), en cap altre cas no s'han de fer servir lletres minúscules com a símbols atòmics. Com a conseqüència, hom no recomana l'ús de *d* i *t* en nomenclatura química fora del sistema de Broughton.

Regla H-1.2. Definicions i fórmules de diversos tipus de modificació isotòpica.

1.21- Un compost *no modificat* isotòpicament té una composició macroscòpica tal que els seus núclids constituents s'hi troben presents en les proporcions amb què hi ocorren en la natura. Hom escriu la seva fórmula i el seu nom de la manera usual.

Exemples:

- | | |
|--|--------|
| 1. CH_4 | Metà |
| 2. $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$ | Etanol |

1.22- Un compost *modificat* isotòpicament té una composició macroscòpica tal que el quocient isotòpic de núclids d'almenys un element es desvia, de forma mesurable, del que ocorre en la natura. Es pot tractar d'un compost *substituït* isotòpicament o d'un compost *marcat* isotòpicament.

1.23- Un compost *substituït* isotòpicament té una composició macroscòpica tal que, de fet, totes les seves molècules tenen *solament* el nucli (o núclids) indicat(s) a cada posició designada. Per a totes les altres posicions, l'absència d'indicació de núclid indica que la composició dels núclids és la natural.

La fórmula d'un compost *substituït* isotòpicament s'escriu de la manera usual, excepció feta de l'ús dels símbols de núclids adient. Quan es troben diferents isòtops del mateix element a la mateixa posició, és pràctica habitual escriure llurs símbols en ordre creixent de nombre de massa.

Exemples (per als noms, vegeu la regla H-2.11):

1. $^{14}\text{CH}_4$ (^{14}C)Metà
2. $^{12}\text{CHCl}_3$ (^{12}C)Cloroform
3. $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{H-OH}$ ($1\text{-}^2\text{H}_1$)Etanol
i no
 $\text{CH}_3\text{-C}^2\text{HH-OH}$

1.24- Un compost *marcat* isotòpicament és una mescla d'un compost no modificat isotòpicament amb un o més composts substituïts isotòpicament, anàlegs del primer.

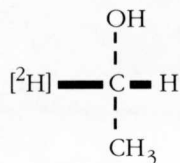
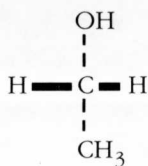
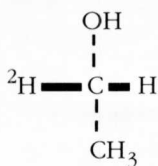
Nota: Malgrat que un compost marcat isotòpicament és de fet una mescla des del punt de vista químic (de la mateixa manera que ho és un compost no modificat), a efectes de nomenclatura hom sol anomenar aquestes mescles com a «compostos marcats isotòpicament».

1.25- Un compost marcat isotòpicament es designa com a *marcat específicament* quan un *únic* compost substituït isotòpicament s'ha afegit formalment al compost no modificat isotòpicament anàleg. En aquest cas, es defineixen tant les posicions com el nombre de cada núclid marcador.

La fórmula estructural d'un compost marcat específicament s'escriu de la manera usual, però amb els símbols apropiats dels núclids i els subíndexs multiplicadors, si n'hi ha, col.locats entre *claudàtors*. Altres criteris per escriure la fórmula es troben descrits a la regla H-1.23.

Exemples:

Compost substituït isotòpicament	en afegir-se a	Compost no modificat isotòpicament	dóna lloc a	Compost marcat específicament
1. $^{14}\text{CH}_4$		CH_4		$[^{14}\text{C}]\text{H}_4$
2. CH_2^2H_2		CH_4		$\text{CH}_2[{}^2\text{H}]_2$
3. $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-}^{18}\text{OH}$		$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$		$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-}[{}^{18}\text{O}]\text{H}$
4. $\text{CH}^2\text{H}_2\text{-CH}_2\text{-O}^2\text{H}$		$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$		$\text{CH}[{}^2\text{H}]_2\text{-CH}_2\text{-O}[{}^2\text{H}]$
5.				



Nota: Malgrat que la fórmula d'un compost marcat específicament no representa la composició del producte en conjunt, el qual conté usualment una proporció molt majoritària del compost no modificat isotòpicament, indica la presència del compost de més interès, és a dir, el substituït isotòpicament.

Un compost marcat específicament és: (a) *marcat de manera senzilla* quan el compost substituït isotòpicament té un sol àtom modificat isotòpicament, essent-ne un exemple, $\text{CH}_3\text{-CH}^{[2\text{H}]\text{-OH}}$; (b) *marcat de manera múltiple* quan el compost substituït isotòpicament té més d'un àtom modificat del mateix element i a la mateixa posició o a posicions diferents; en són exemples $\text{CH}_3\text{-C}^{[2\text{H}_2]\text{-OH}}$ i $\text{CH}_2^{[2\text{H}]\text{-CH}^{[2\text{H}]\text{-OH}}$; o (c) *marcat de manera mixta* quan el compost substituït isotòpicament té més d'un tipus d'àtom modificat, essent-ne un exemple, $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-}^{[18\text{O}][2\text{H}]}$.

1.26- Un compost marcat isotòpicament es designa com *marcat selectivament* quan una *mescla* de composts substituïts isotòpicament s'afegeix formalment al compost no modificat isotòpicament anàleg, de tal manera que la posició o posicions, però no necessàriament el nombre de cada núclid marcador, estiguin definides. Un compost marcat selectivament pot ésser considerat com a mescla de composts marcats específicament.

Un compost marcat selectivament pot ésser: (a) *marcat de manera múltiple*, quan en el compost no modificat hi ha més d'un àtom del mateix element a la posició on hi ocorre la modificació isotòpica, per exemple, H en CH_4 , o hi ha diversos àtoms del mateix element a posicions diferents on hi ocorre la modificació isotòpica, per exemple, C en $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}$; o (b) *marcat de manera mixta*, quan en el compost hi ha més d'un núclid marcador, per exemple C i O en $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$.

Nota: Quan en un compost hi ha un sol àtom d'un element susceptible d'ésser modificat, només en pot resultar el marcatge específic (vegeu la regla H-1.25).

Un compost marcat selectivament no pot ésser descrit per una fórmula estructural única; llavors se'l representa inserint els símbols dels núclids precedits per qualsevol localitzador(s) necessari(s) (lletres i/o números), però sense subíndexs multiplicadors, i entre claudàtors, directament abans de la fórmula usual o, si cal, davant de parts de la fórmula que tenen una numeració independent. Els localitzadors idèntics no es repeteixen.

Quan hi ha núclids diferents, s'escriuen els símbols dels núclids per ordre alfabètic, d'acord amb llurs símbols; quan els símbols atòmics són idèntics, s'indiquen en ordre de nombre de massa creixent (vegeu les regles H-2.81 i H-2.82).

Exemples:

	Mescla de composts substituïts <u>isotòpicament</u>	en afegir-se a	Compost no modificat <u>isotòpicament</u>	dóna lloc a	Compost marcat <u>selectivament</u>
1.	$\left\{ \begin{array}{l} \text{CH}_3^2\text{H}, \text{CH}_2^2\text{H}_2 \\ \text{CH}^2\text{H}_3, \text{C}^2\text{H}_4 \\ \text{o qualssevol dos} \\ \text{o més d'entre ells} \end{array} \right\}$		CH_4		$[\text{}^2\text{H}]\text{CH}_4$
2.	$\left\{ \begin{array}{l} \text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}^2\text{H-CO}_2\text{H} \\ \text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-C}^2\text{H}_2\text{-CO}_2\text{H} \end{array} \right\}$		$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CO}_2\text{H}$		$[\text{}^2\text{H}]\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CO}_2\text{H}$
3.	$\left\{ \begin{array}{l} \text{CH}_3\text{-}^{14}\text{CH}_2\text{-}^{14}\text{CH}_2\text{-CO}_2\text{H} \\ \text{CH}_3\text{-}^{14}\text{CH}_2\text{-CH}_2\text{-CO}_2\text{H} \\ \text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-}^{14}\text{CH}_2\text{-CO}_2 \\ \text{o qualssevol dos d'ells} \end{array} \right\}$		$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CO}_2\text{H}$		$[\text{}^{2,3}\text{-}^{14}\text{C}]\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CO}_2\text{H}$
4.	$\left\{ \begin{array}{l} \text{CH}_3\text{-}^{14}\text{CH}_2\text{-OH} \\ \text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-}^{18}\text{OH} \\ \text{CH}_3\text{-}^{14}\text{CH}_2\text{-}^{18}\text{OH} \\ \text{o qualssevol dos d'ells} \end{array} \right\}$		$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$		$[\text{}^{1-14}\text{C}, \text{}^{18}\text{O}]\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$
5.	$\left\{ \begin{array}{l} \text{}^{14}\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CO}_2\text{-CH}_3 \\ \text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CO}_2\text{-}^{14}\text{CH}_3 \\ \text{}^{14}\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CO}_2\text{-}^{14}\text{CH}_3 \\ \text{o qualssevol dos d'ells} \end{array} \right\}$		$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CO}_2\text{-CH}_3$		$[\text{}^{3-14}\text{C}]\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CO}_2\text{-}[\text{}^{14}\text{C}]\text{CH}_3$

Nota: El procediment d'escriure fórmules indicat per aquesta regla pot també ésser útil si un compost és representat per la seva fórmula molecular en comptes de la seva fórmula estructural, com ara $[^2\text{H}]\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$.

1.27- En un compost marcat selectivament, derivat formalment de la mescla de diversos composts substituïts isotòpicament, els quals són coneguts, amb el compost immodificat isotòpicament anàleg, el nombre o el nombre possible de núclids per a cada posició pot indicar-se mitjançant subíndexs en els símbols atòmics. Dos o més subíndexs que es refereixen al mateix símbol de núclid se separen per un punt i coma. Per a un compost marcat de manera múltiple o mixta (vegeu la regla H-1.26), els subíndexs s'escriuen successivament i en el mateix ordre com són considerats els diversos composts substituïts isotòpicament. El subíndex zero s'empra per indicar que un dels composts substituïts isotòpicament no es troba modificat en la posició indicada.

Exemples:

Mescla de composts substituïts <u>isotòpicament</u>	en afegir-se a	Compost no modificat <u>isotòpicament</u>	dóna lloc a	Compost marcat <u>selectivament</u>
1. $\left\{ \begin{array}{l} \text{CH}_2^2\text{H}-\text{CH}_2-\text{OH} \\ \text{CH}^2\text{H}_2-\text{CH}_2-\text{OH} \end{array} \right\}$		$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{OH}$		$[2\text{-}^2\text{H}_{1,2}]\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{OH}$
2. $\left\{ \begin{array}{l} \text{CH}^2\text{H}_2-\text{CH}_2-\text{OH} \\ \text{CH}^2\text{H}_2-\text{CH}_2\text{-}^{18}\text{OH} \end{array} \right\}$		$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{OH}$		$[2\text{-}^2\text{H}_{2,2}, ^{18}\text{O}_{0,1}]\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{OH}^*$
3. $\left\{ \begin{array}{l} \text{CH}_3-\text{CH}_2\text{-}^{18}\text{OH} \\ \text{CH}^2\text{H}_2-\text{CH}_2-\text{OH} \end{array} \right\}$		$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{OH}$		$[2\text{-}^2\text{H}_{0,2}, ^{18}\text{O}_{1,0}]\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{OH}$
4. $\left\{ \begin{array}{l} \text{CH}_3-\text{CH}^2\text{H}-\text{OH} \\ \text{CH}^2\text{H}_2-\text{CH}_2-\text{OH} \end{array} \right\}$		$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{OH}$		$[1\text{-}^2\text{H}_{1,0}, 2\text{-}^2\text{H}_{0,2}]\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{OH}$

* La repetició de localitzadors no és necessària, atès que pot comportar ambigüitat. Com a conseqüència, han estat suprimits d'aquesta edició i hom hi *ba afegit un subíndex*.

1.28- Un compost marcat isotòpicament es designa com a *marcat no selectivament* quan tant les posicions com el nombre de núclids marcadors són alhora indefinits.

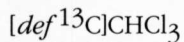
En aquests casos, el marcatge s'indica per inserció del símbol del núclid, col.locat entre claudàtors, directament abans de la fórmula lineal usual, sense fer servir localitzadors ni subíndexs.

Exemple:



1.29- Un compost marcat isotòpicament pot designar-se com *deficient isotòpicament* quan el contingut isotòpic d'un o més elements ha estat rebaixat, és a dir, quan un o més núclids es troben presents en menor proporció que la natural. Un compost modificat isotòpicament com aquest es denota a la fórmula mitjançant l'addició de la síl.laba italianitzada *def* immediatament abans, sense guionet, del símbol del núclid corresponent.

Exemple:



Nota: Des d'un altre punt de vista es podria emprar també $[^{12}\text{C}]\text{CHCl}_3$.

H-2. NOMS PER A COMPOSTS MODIFICATS ISOTÒPICAMENT

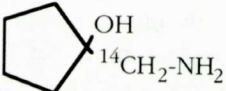
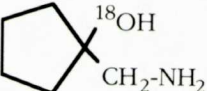
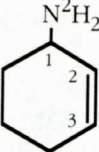
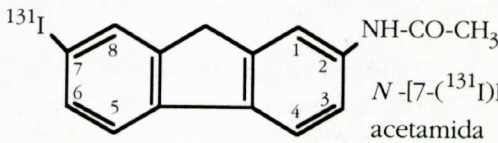
Regla H-2.1. Composts substituïts isotòpicament (cf. amb la regla H-1.23)

2.11- El nom d'un compost substituït isotòpicament es forma per inserció, entre parèntesis, dels símbols dels núclids, precedits pels localitzadors necessaris (lletres i/o numerals), davant el nom *o preferiblement* davant de la denominació d'aquella part del compost que es troba substituïda isotòpicament. Immediatament després dels parèntesis no hi ha d'anar cap espai ni cap guionet; ara bé, quan el nom o una part del nom contingui un localitzador que el precedeixi, llavors cal inserir un guionet.*

Quan és possible la polisubstitució, el nombre d'àtoms substituïts s'especifica sempre com a subíndex a la dreta dels símbols atòmics, incloent-hi la mono-substitució.

* En general, en la nomenclatura orgànica, els localitzadors per a sufixs, insaturació, valències lliures, etc., citats davant del compost fonamental, es consideren com a part del nom. En aquest treball, se segueix la pràctica de citar el descriptor isotòpic davant d'aquests localitzadors; en la pràctica bioquímica, el descriptor isotòpic s'hi escriu sovint després.

Exemples:

1. $^{14}\text{CH}_4$ (^{14}C)Metà
2. CH_3^2H ($^2\text{H}_1$)Metà
3. $\text{C}^2\text{H}_2\text{Cl}_2$ Dicloro($^2\text{H}_2$)metà
4.  1-[Amino(^{14}C)metil]ciclopentanol
5.  1-(Aminometil)ciclopentan(^{18}O)ol
1-(Aminometil)(^{18}O)ciclopentanol
6.  2-Ciclohexen-1-($^2\text{H}_2$)amina
(N,N - $^2\text{H}_2$)-2-Ciclohexen-1-amina
7.  N -[7-(^{131}I)Iodofluoren-2-il] acetamida
8. $\begin{array}{c} ^{14}\text{CH}_2-\text{CO}_2\text{C}_2\text{H}_5 \\ | \\ ^{14}\text{CH}_2-\text{CO}_2\text{Na} \end{array}$ ($2,3$ - $^{14}\text{C}_2$)Succinat d'etil i de sodi

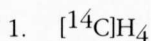
Regla H-2.2. Composts marcats específicament (cf. amb la regla H-1.25)

2.21- El nom d'un compost marcat específicament es forma per inserció, *entre claudàtors*, dels símbols dels núclids, precedits pels localitzadors necessaris (lletres i/o numerals), davant el nom *o preferiblement* davant la denominació d'aquella part del compost que es troba modificada isotòpicament. Immediatament després dels claudàtors no hi ha d'anar cap espai ni cap guionet; ara bé, quan el nom o una part del nom requereix un localitzador que el precedeixi, llavors cal inserir un guionet.*

Quan un polimarcatge és possible, el nombre d'àtoms que han estat marcats s'especifica sempre com a subíndex dels símbols atòmics, incloent-hi el cas del monomarcatge. Això és necessari per tal de poder fer la distinció entre un compost marcat específicament i un de marcat selectivament o no selectivament.

El nom d'un compost marcat específicament difereix del nom del corresponent compost substituït isotòpicament (vegeu la regla H-2.11), en l'ús de *claudàtors* en comptes de *parèntesis*, per encerclar el descriptor del núclid.

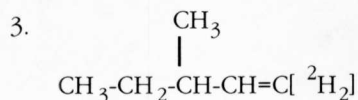
Exemples:



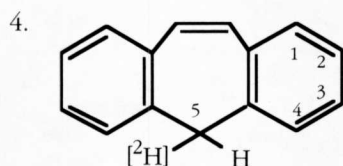
$[^{14}\text{C}]\text{Metà}$



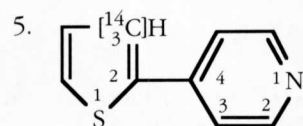
$[{}^2\text{H}_1]\text{Metà}$



3-Metil[1,1- ${}^2\text{H}_2$]-1-pentè +



$[5-{}^2\text{H}_1]$ -5H -Dibenzo[*a,d*]cicloheptè +



4-([3- ^{14}C]-2-Tienil)piridina +

* Vegeu la nota al peu de la pàg. 13.

+ Cal fer notar que en aquest cas el localitzador és part del nom de l'hidrocarbur fonamental; vegeu també la nota al peu de la pàg. 13.

6. $\text{Cl}^{[2\text{H}_2]}\text{Cl}_2$ Dicloro $^{[2\text{H}_2]}$ metà
7. $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-O}^{[2\text{H}]}$ Etan $^{[2\text{H}]}$ ol o $[\text{O-}^{[2\text{H}}]\text{Etanol}$
8. 6-Metil $^{[2,2,3-^2\text{H}_3]}$ -1,2,3,4-tetrahidro-1-naftol ⁺
9. 1-(Amino $^{[14\text{C}]}$ metil)ciclopentanol
10. $^{[2,2-^2\text{H}_2]}$ -1(2H)-Naftalenona
11. $^{[131\text{I}]}$ -N-(7- $^{[131\text{I}]}$ Iodofluoren-2-il)acetamida
12. $^{[131\text{I}]}$ -N-(6,7- $^{[6-^{131}\text{I}]}$ Diiodofluoren-2-il)acetamida

⁺ En casos com aquest, hom recomana el tractament dels prefixos hidro com a no separables; vegeu la regla C-16.11 de les Regles de Nomenclatura Orgànica (ref. 6, pag. 108).

Exemples:

1. $(\text{CH}_3)_2\text{CH}-\text{CH}_2-[^{14}\text{C}]\text{H}(\text{NH}_2)\text{CO}_2\text{H}$ $[2-^{14}\text{C}]\text{Leucina}$
2. $\text{CH}_3-[^{35}\text{S}]-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{CO}_2\text{H}$ $[^{35}\text{S}]\text{Metionina}$
3. $\text{CH}_3-\text{CO}-\text{NH}[^2\text{H}]$ $[\text{N}-^2\text{H}_1]\text{Acetamida}$
 O
 $\text{Acet}[^2\text{H}_1]\text{amida}$

Nota: El sistema alternatiu, basat en els criteris de Boughton (vegeu la Introducció), denota la modificació isotòpica citant el símbol adient i el nombre de massa (amb subíndex i localitzadors quan calgui) *a continuació* de la part del nom a la qual el símbol fa referència.

Exemple:



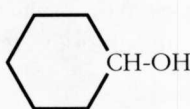
D'acord amb les regles aquí recomanades, el nom d'aquest compost és:
 2-(^{35}Cl)cloro-3-[($^2\text{H}_3$)metil](1- $^2\text{H}_1$)pentà.

Regla H-2.3. Composts marcats selectivament (cf. amb les regles H-1.26 i H-1.27)

2.31- El nom d'un compost marcat *selectivament* es forma de la mateixa manera que el d'un compost marcat *específicament* (vegeu la regla H-2.21), si bé, i excepció feta del que descriu la regla H-2.32, s'ometen generalment els subíndexs multiplicadors que segueixen els símbols atòmics. Hom no repeteix localitzadors idèntics que corresponguin al mateix element.

El nom d'un compost marcat selectivament difereix del nom del corresponent compost substituït isotòpicament en l'ús de *claudàtors* en comptes de parèntesis per encerclar el descriptor del núclid i en l'omissió de localitzadors idèntics repetits i de subíndexs multiplicadors.

Exemples:

Mescla de composts substituïts <u>isotòpicament</u>	en afegir-se a	<u>s'anomena</u>
1. $\left\{ \begin{array}{l} \text{CH}_3^2\text{H}, \text{CH}_2^2\text{H}_2 \\ \text{CH}^2\text{H}_3, \text{C}^2\text{H}_4 \end{array} \right\}$	CH_4	[² H]Metà <i>ino</i> [² H ₄]Metà
2. $\left\{ \begin{array}{l} \text{CH}_3\text{-CH}^2\text{H-OH} \\ \text{CH}_3\text{-C}^2\text{H}_2\text{-OH} \end{array} \right\}$	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$	[1- ² H]Etanol <i>ino</i> [1,1- ² H ₂]Etanol
3. $\left\{ \begin{array}{l} \text{[}^3\text{H]HC} \text{---} \text{CH-OH} \\ \text{[}^3\text{H}_2\text{]C} \text{---} \text{CH-OH} \end{array} \right\}$		[4- ³ H]Ciclohexanol <i>ino</i> [4,4- ³ H ₂]Ciclohexanol
4. $\left\{ \begin{array}{l} ^{14}\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CO}_2\text{-CH}_2\text{CH}_3 \\ \text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CO}_2\text{-}^{14}\text{CH}_2\text{-CH}_3 \end{array} \right\}$	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CO}_2\text{-CH}_2\text{CH}_3$	[3- ¹⁴ C]Propionat d'[1- ¹⁴ C]etil

2.32- En un compost marcat selectivament, derivat formalment de la mescla de diversos composts substituïts isotòpicament, els quals són coneguts, amb el compost no modificat isotòpicament anàleg, el nombre o nombre possible de núclid(s) marcadors per a cada posició poden indicar-se mitjançant subíndexs del símbol(s) atòmic(s), tal i com es descriu a la regla H-1.27.

Exemples:

	Mescla de composts substituïts <u>isotòpicament</u>	en afegir-se a	<u>s'anomena</u>
1.	$\left\{ \begin{array}{l} \text{CH}_2^2\text{H}-\text{CH}_2-\text{OH} \\ \text{CH}^2\text{H}_2-\text{CH}_2-\text{OH} \end{array} \right\}$	$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{OH}$	$[\text{2-}^2\text{H}_{1,2}]$ Etanol
2.	$\left\{ \begin{array}{l} \text{CH}_3-\text{CH}_2-^{18}\text{OH} \\ \text{CH}^2\text{H}_2-\text{CH}_2-\text{OH} \end{array} \right\}$	$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{OH}$	$[\text{2-}^2\text{H}_{0,2}, ^{18}\text{O}_{1,0}]$ Etanol

Regla H-2.4. Composts marcats no selectivament (cf. amb la regla H-1.28)

2.41- El nom d'un compost marcat no selectivament es forma de la mateixa manera que el d'un compost marcat selectivament (vegeu la regla H-2.31.), si bé no conté ni localitzadors ni subíndexs en el descriptor del núclid.

Exemples:

Cloro[^3H]benzè

[^{14}C]Glicerol

Regla H-2.5. Composts deficients isotòpicament (cf. amb la regla H-1.29)

2.51- El nom d'un compost deficient isotòpicament pot formar-se afegint la síl.laba *def*, en cursiva, immediatament davant i sense guionet, del símbol del núclid adient, tancant síl.laba i símbol entre claudàtors i citant-los davant el nom o aquella part del nom que es troba modificada isotòpicament.

Exemple:

[*def* ^{13}C]Cloroform

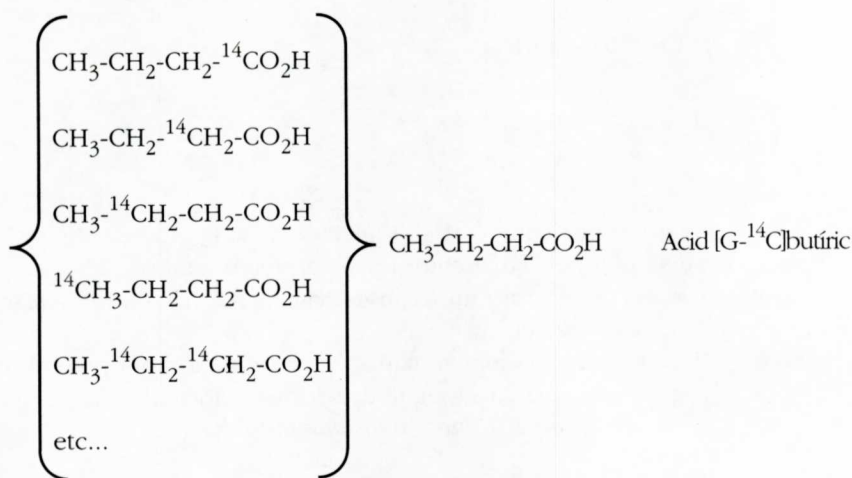
Regla H-2.6. Marcatge general i uniforme

2.61- En el nom d'un compost marcat selectivament, en el qual *totes* les posicions de l'element designat estan marcades, però no necessàriament en la *mateixa relació isotòpica*, hom pot emprar el símbol «G» en comptes dels localitzadors per tal d'indicar un marcatge «general».

Exemples:

Composts substituïts <u>isotòpicament</u>	en afegir-se <u>a</u>	poden anomenar-se <u>com</u>
---	-----------------------------	------------------------------------

1. mescla de composts substituïts
(marcatge selectiu)



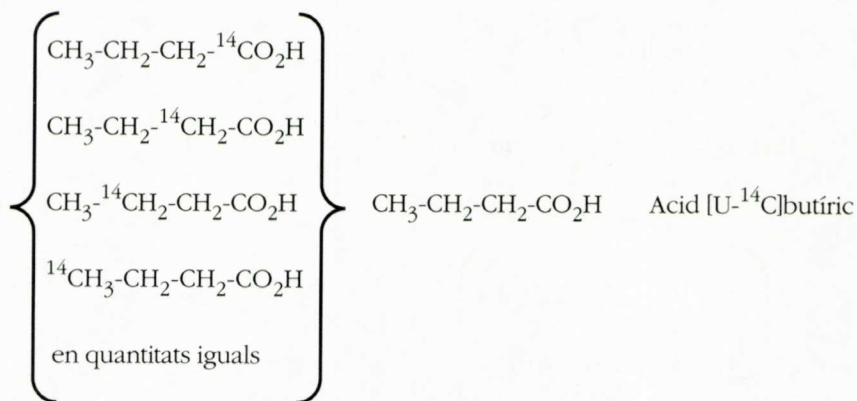
2. Hom pot designar com $\underline{\text{D}}\text{-[G-}^{14}\text{C]glucosa}$ a la $\underline{\text{D}}\text{-glucosa}$ en la qual les sis posicions es troben marcades, però no necessàriament de manera uniforme.

2.62- En el nom d'un compost marcat selectivament, en el qual *totes* les posicions de l'element designat estan marcades en la *mateixa relació isotòpica*, hom pot emprar el símbol «U» en comptes dels localitzadors per tal d'indicar un marcatge «uniforme».

Exemples:

Composts substituïts
isotòpicament en afegir-se a poden anomenar-se com

1. mescla de composts substituïts
(marcatge selectiu)



2. Hom pot designar com D-[U-¹⁴C]glucosa a la D-glucosa en la qual el ¹⁴C es troba distribuït per igual entre les sis posicions carbonades.

Nota: En el cas de núclids radioactius, «mateixa relació isotòpica» significa «mateixa radioactivitat específica».

2.63- En el nom d'un compost marcat selectivament, hom pot emprar el símbol «U» (vegeu la regla H-2.62) seguit dels localitzadors adients, per indicar marcatge a les posicions específiques en la mateixa relació isotòpica.

Exemple:

Hom pot designar com D-[U-1,3,5-¹⁴C]glucosa a la D-glucosa en la qual el ¹⁴C es troba distribuït per igual entre les posicions 1,3,5.

Regla H-2.7 Canvis excepcionals en els noms d'alguns composts modificats asimètricament

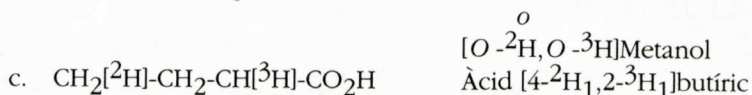
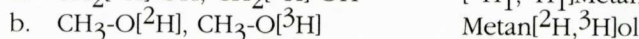
2.71- El nom d'un compost modificat isotòpicament, substituït o marcat, pot diferir del nom d'un anàleg no modificat quan la seva estructura inclou unitats idèntiques que no es troben idènticament modificades en posicions equivalents. En cas que hi hagi ambigüitat, els grups diferents s'han d'indicar de forma separada.

Exemples:

1. Compost substituït poliisotòpic



2. Composts marcats específicament poliisotòpics



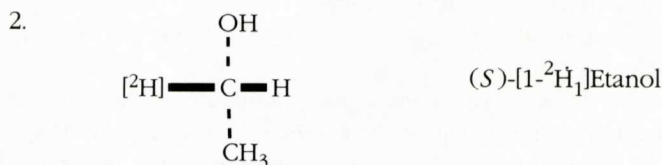
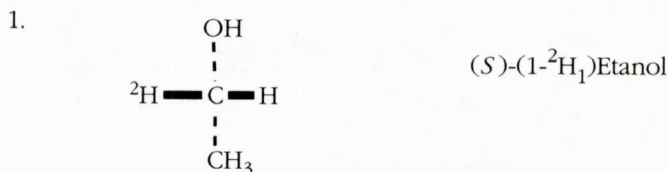
Regla H-2.9. Composts modificats isotòpicament estereoisomèrics

2.91- Són possibles dos tipus de composts modificats isotòpicament estereoisomèrics: (a) aquells en els quals l'estereoisomerisme és conseqüència de la modificació isotòpica, i (b) aquells els anàlegs no modificats dels quals són estereoisòmers.

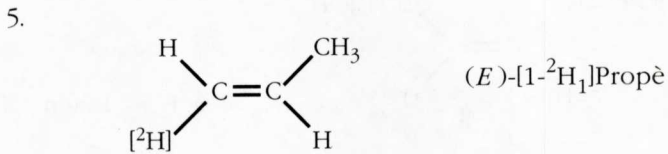
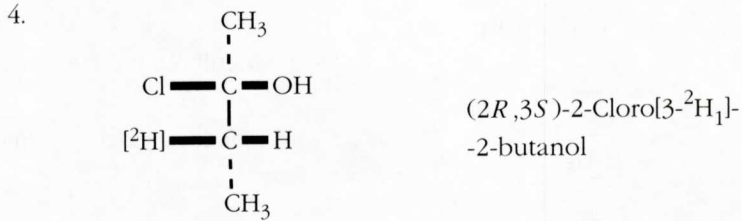
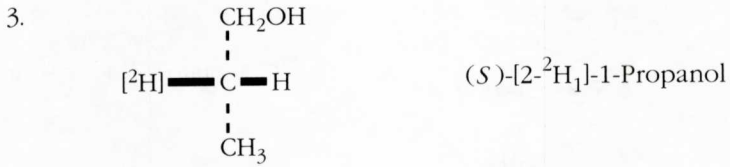
La nomenclatura d'estereoisòmers de composts modificats isotòpicament segueix els criteris generals de nomenclatura estereoquímica (secció E).*

D'acord amb les regles d'estereoquímica, els afixs se citen al lloc especificat en el nom. Quan han d'ésser inserits en el nom en el mateix lloc que els descriptors isotòpics, hom cita primer els afixs estereoquímics.

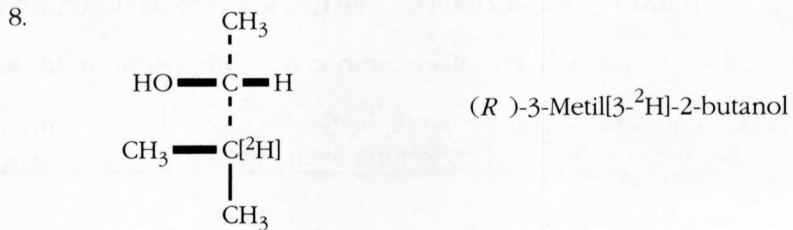
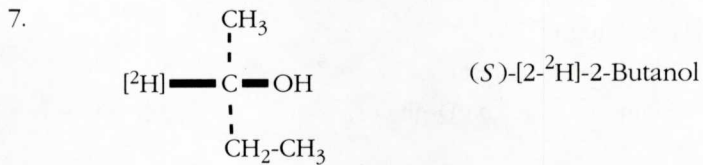
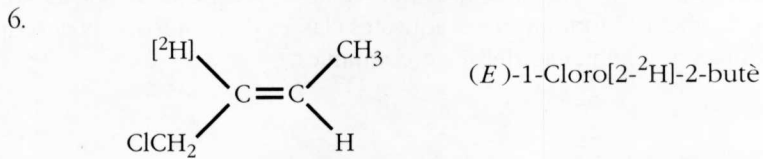
Exemples en els quals l'estereoisomerisme és conseqüència de la modificació isotòpica:



* N.T. La versió catalana de la secció E de les regles de Nomenclatura de Química Orgànica de la I.U.P.A.C. no ha estat encara publicada.



Exemples d'estereoisòmers modificats isotòpicament:



9.
$$\begin{array}{c} {}^{14}\text{CH}_3\text{-CO-O} \\ | \\ \text{H} \text{---} \text{C} \text{---} \text{CH}_3 \\ | \\ \text{C}_2\text{H}_5 \end{array}$$
 (2- ^{14}C)Acetat d'(*R*)-*sec*-butil
10.
$$\begin{array}{c} \text{CO-O-}[^{14}\text{C}]\text{H}_3 \\ | \\ \text{H} \text{---} \text{C} \text{---} \text{CH}_3 \\ | \\ \text{C}_2\text{H}_5 \end{array}$$
 (*R*)-2-Metilbutirat de [^{14}C]metil
o
(*R*)-(2-Metilbutirat de [^{14}C]metil)
11.
$$\begin{array}{c} \text{HO-C}^{[2}\text{H}_2] \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{C}=\text{C} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$$
 (*Z*)-[1,1,4,4- $^2\text{H}_4$]-2-Buten-1,4-diol

2.92- Els afixs estereoquímics (per exemple D i L), afegits d'acord amb les regles de tipus especials de composts, com ara hidrats de carboni, aminoàcids, esteroides, etc, es refereixen normalment al compost fonamental (o compost no modificat), segons quin sigui el tipus particular de composts. No obstant i això i seguint la pràctica bioquímica, en aquestes classes de composts els descriptors isotòpics van a continuació dels estereoquímics.*

Exemples:

1. $\underline{\text{L}}$ -[3,4- ^{13}C , ^{35}S]Metionina
2. $\underline{\text{L}}$ -[3- ^{14}C ,2,3- $^2\text{H}_2$, ^{15}N]Serina
3. 5α -[17- ^2H]Pregnà
4. (24*R*)-5a-[24- $^2\text{H}_1$]Colestà
5. 2-([^{18}F]Fluoro)-2-desoxi- $\underline{\text{D}}$ -glucosa

H-3. NUMERACIÓ DELS COMPOSTS MODIFICATS ISOTÒPICAMENT

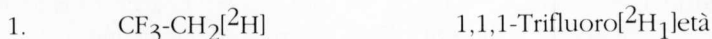
Regla H-3.1. Numeració en relació amb la del compost no modificat

3.11- La numeració d'un compost modificat isotòpicament *no* canvia respecte la d'un compost no modificat isotòpicament. Tal com indiquen la regla C-

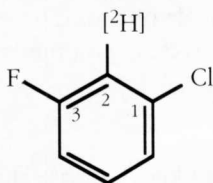
* Vegeu la nota al peu de la pàg. 13.

15.11, pag. 105 (ref. 6) i la secció E *, d'entre les característiques estructurals d'un compost que han d'ésser tingudes en compte successivament per a la numeració, la presència de núclids es considera al final, amb l'excepció de la quiralitat originada per modificació isotòpica (vegeu la regla H-3.22, exemple 7).

Exemples:

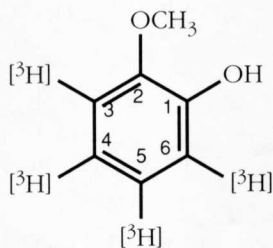


2.



1-Cloro-3-fluoro[${}^2\text{-}^2\text{H}$]benzè

3.



2-Metoxi[3,4,5,6- ${}^3\text{H}_4$]fenol

Nota: Cal tenir en compte que quan els composts modificats isotòpicament s'anomenen pel sistema basat en una extensió dels criteris de Boughton (vegeu Introducció, pag. 1), els localitzadors més baixos s'assignen a les posicions isotòpicament incloses en l'estructura fonamental, la qual inclou insaturacions i grups principals, si n'hi ha, abans d'altres consideracions. Això, de vegades, comporta l'assignació dels números més alts per a substituents expressats amb prefixos, la qual cosa pot donar lloc a una numeració que difereixi de l'assignada seguint la regla H-3.1.

Exemple:



Vegeu que aquí la presència del deuteri (*d*) causa que l'àtom de carboni al qual es troba unit sigui assignat com a 1. Per a més detalls i exemples, vegeu la ref. 4.

* Vegeu la nota al peu de la pàg. 24.

Regla H-3.2. Prioritat entre àtoms o grups modificats isotòpicament i no modificats isotòpicament

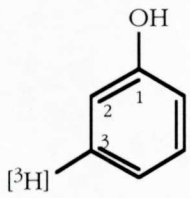
3.21- Quan en un compost no modificat isotòpicament hi ha opcions entre possibilitats equivalents per a l'elecció de cadena principal o sistema cíclic de més alta jerarquia, es tria la cadena principal o sistema cíclic de més alta jerarquia del compost modificat isotòpicament anàleg, de manera que inclogui el nombre màxim d'àtoms o grups modificats. Si encara hi roman més d'una opció, es dóna prioritat a la cadena principal o sistema cíclic de més alta jerarquia que contingui el núclid de nombre atòmic més gran. En el cas de núclids diferents d'un mateix element, es dóna prioritat al núclid de nombre de massa més elevat.

Exemples:

- | | | |
|----|---|--|
| 1. | $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{Cl}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}-\text{CH}_2[{}^2\text{H}] \\ 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad 5 \end{array}$ | <p>1-Cloro-4-metil[5-${}^2\text{H}_1$]pentà
i <i>no</i>
1-Cloro-4-([${}^2\text{H}_1$]metil)pentà</p> |
| 2. | $\begin{array}{c} \text{CH}_2[{}^2\text{H}] \\ \\ \text{Cl}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}-[{}^{14}\text{C}]\text{H}_3 \\ 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad 5 \end{array}$ | <p>1-Cloro-4-([${}^2\text{H}_1$]metil)[5-${}^{14}\text{C}$]pentà
i <i>no</i>
1-Cloro-4-([${}^{14}\text{C}$]metil)[5-${}^2\text{H}_1$]pentà</p> |
| 3. | $\begin{array}{c} \text{CH}_2[{}^{79}\text{Br}] \\ \\ \text{CH}_2[{}^{81}\text{Br}]-\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_3 \\ 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \end{array}$ | <p>1-([${}^{81}\text{Br}$]Bromo)-2-([${}^{79}\text{Br}$]bromo-
-metil)butà
i <i>no</i>
1-([${}^{79}\text{Br}$]Bromo)-2-([${}^{81}\text{Br}$]bromo-
-metil)butà</p> |

3.22- Quan en un compost no modificat isotòpicament hi ha opció entre numeracions equivalents, el punt de començament i la direcció de la numeració del compost modificat isotòpicament anàleg, es trien de manera que s'assignin els localitzadors més baixos als àtoms o grups *modificats*, considerat conjuntament en una sèrie d'ordre numèric creixent (vegeu la regla C-15.11, pag. 105, ref. 6). Si encara hi roman una opció, es dóna prioritat per als localitzadors més baixos al núclid de nombre atòmic més alt. En el cas de núclids diferents d'un mateix element, té prioritat el núclid de nombre de massa més elevat.

Exemples:

1. $\text{CH}_3\text{-}^{14}\text{C}_1\text{H}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_3$ $[2\text{-}^{14}\text{C}]\text{Butà}$
i no
 $[3\text{-}^{14}\text{C}]\text{Butà}$
2. $\text{CH}_3\text{-C}^{2}\text{H}_2\text{-}^{14}\text{C}_3\text{H}_2\text{-CH}_3$ $[3\text{-}^{14}\text{C}, 2, 2\text{-}^2\text{H}_2]\text{Butà}$
i no
 $[2\text{-}^{14}\text{C}, 3, 3\text{-}^2\text{H}_2]\text{Butà}$
3. $\text{CH}_3\text{-}^{14}\text{C}_1\text{H}_2\text{-CH}^{2}\text{H}_3\text{-CH}_3$ $[2\text{-}^{14}\text{C}, 3\text{-}^2\text{H}_1]\text{Butà}$
i no
 $[3\text{-}^{14}\text{C}, 2\text{-}^2\text{H}_1]\text{Butà}$
4.  $[3\text{-}^3\text{H}]\text{Fenol}$
5. $\begin{array}{c} \text{CH}_2\text{[}^2\text{H]} \\ | \\ \text{H} - \text{C} - \text{OH} \\ | \\ \text{CH}_3 \end{array}$ $(R)\text{-}[1\text{-}^2\text{H}_1]\text{-2-Propanol}$
6. $\begin{array}{c} \text{CH}_2\text{[}^{125}\text{I]} \\ | \\ \text{H} - \text{C} - \text{OH} \\ | \\ \text{CH}_2\text{I} \end{array}$ $(S)\text{-}1,3\text{-}[1\text{-}^{125}\text{I}_1]\text{Diiodo-2-propanol}$
7. $\begin{array}{c} \text{H} \qquad \qquad \text{H} \\ | \qquad \qquad | \\ \text{CH}_3 - \text{C} - \text{CH}_2 - \text{C} - \text{CH}_3 \\ | \qquad \qquad | \\ \text{[}^3\text{H]} \qquad \qquad \text{[}^2\text{H]} \\ 1 \qquad 2 \quad 3 \quad 4 \quad 5 \end{array}$ $(2S, 4R)\text{-}[4\text{-}^2\text{H}_1, 2\text{-}^3\text{H}_1]\text{Pentà}$
ino
 $(2R, 4S)\text{-}[2\text{-}^2\text{H}_1, 4\text{-}^3\text{H}_1]\text{Pentà}$

Nota: En l'últim exemple, la numeració segueix la regla H-3.22 més que no

les preferències estereoquímiques descrites a les regles de la Secció E*, les quals donen preferència als grups *R* respecte als *S* per als numerals més baixos.

H-4. LOCALITZADORS PER A NÚCLIDS EN COMPOSTS MODIFICATS ISOTÒPICAMENT

Regla H-4.1. Omissió o introducció de localitzadors

4.11- Quan no hi ha ambigüitat, es pot ometre el localitzador de l'indicador isotòpic en el nom d'un compost modificat isotòpicament.

Exemples:

- | | |
|--|--|
| 1. $\text{Cl}^{[2\text{H}_3]}\text{-CN}$ | $^{[2\text{H}_3]}\text{Acetonitril}$ |
| 2. $\text{CH}_3\text{-NH}^{[2\text{H}]}$ | Metil $^{[2\text{H}_1]}$ amina |
| 3. $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-O}^{[2\text{H}]}$ | Etan $^{[2\text{H}]}$ ol |
| 4. $^{[2\text{H}]\text{O}}\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-O}^{[2\text{H}]}$ | 1,2-Etan $^{[2\text{H}_2]}$ diol |
| 5. $\text{CH}_2^{[2\text{H}]\text{O}}\text{-C}^{[2\text{H}_2]}\text{-S-CH}_2\text{-OOH}$ | Hidroperòxid de
[[$^{[2\text{H}_1]}$ metoxi $^{[2\text{H}_2]}$ metil]tio]metil |

4.12- Quan pot haver-hi ambigüitat, les posicions específiques dels núclids han d'ésser indicades en l'indicador isotòpic amb els localitzadors adients, lletres i/o numerals, precedint el símbol(s) del núclid(s).

Exemples (vegeu també les regles H-2.11, H-2.21, H-2.31):

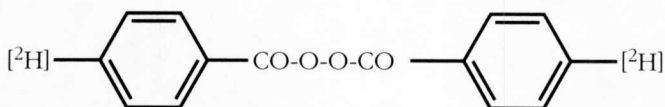
- | | |
|---|--|
| 1. $\text{Cl}^{[2\text{H}_3]}\text{-NH}_2$ | $^{[1,1,1-^2\text{H}_3]}\text{Metilamina}$ |
| 2. $\text{CH}_3\text{-CH}^{[2\text{H}]\text{-OH}}$ | $^{[1-^2\text{H}_1]}\text{Etanol}$ |
| 3. $\text{HO-CH}^{[2\text{H}]\text{-CH}^{[2\text{H}]\text{-OH}}$ | $^{[1,2-^2\text{H}_2]}\text{-1,2-Etandiol}$ |
| 4. | |
| $\text{Cl}^{[2\text{H}_3]}\text{-}\overset{\text{O}}{\parallel}\text{C-Cl}^{[2\text{H}_2]}\text{-CH}_2\text{-CH}_3$ | $^{[1,1,1,3,3-^2\text{H}_5]}\text{-2-Pentanona}$ |

* Vegeu la nota al peu de la pàg. 24.

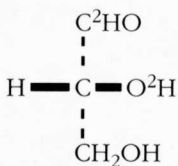
5.



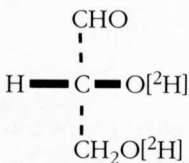
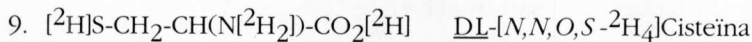
6.

Peròxid de di([4-²H]benzoil)

7.

*(R)*-(O²,1-²H₂)Gliceraldehid*(R)*-(O-²H)Glicer(²H)aldehid

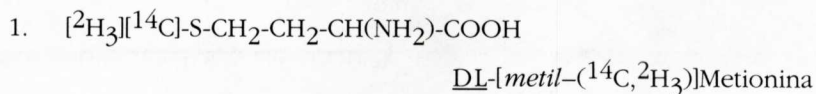
8.

*(R)*-(O²,O³-²H₂)Gliceraldehid

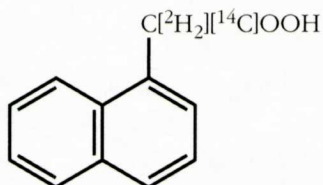
Regla H-4.2. Localització de núclids en posicions de composts que no tenen normalment assignats localitzadors (lletres o numerals)

4.21- Quan un núclid ocupa una posició que no està numerada s'ha de fer servir un prefix en cursiva o una lletra grega per indicar aquesta posició.

Exemples:



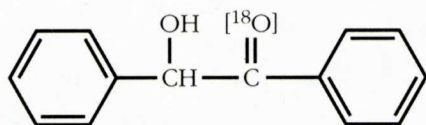
2.



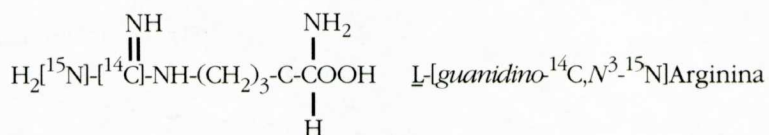
Acid

1-naftalen[carboxi-¹⁴C,α,α-²H₂]acètic

3.

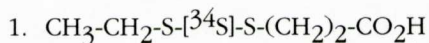
[carbonil-¹⁸O]Benzoïna

4.

L-[guanidino-¹⁴C, N³-¹⁵N]Arginina

4.22- Quan un núclid ocupa una posició que no està numerada o quan la seva posició no pot ésser fàcilment definida d'acord amb les regles H-4.12 i H-4.21, es pot incloure el símbol del núclid en el símbol sencer del grup a través del qual es troba unit a la part principal de l'estructura.

Exemples:

Àcid 3-(etil[S-³⁴S]trítio)propioníc

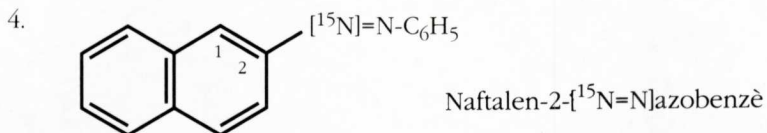
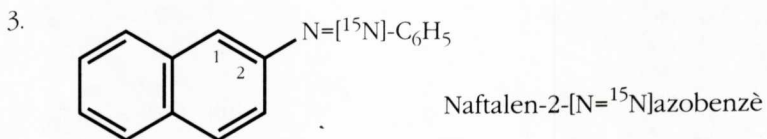
o

Àcid 3-(etil[2-³⁴S]trisulfanil)propioníc*Àcid 3-(etil[³⁴S-S]trítio)propioníc

o

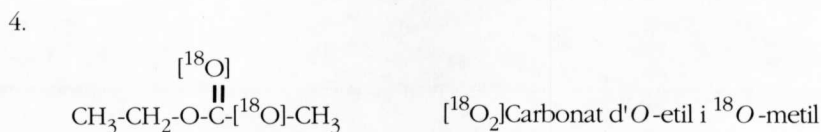
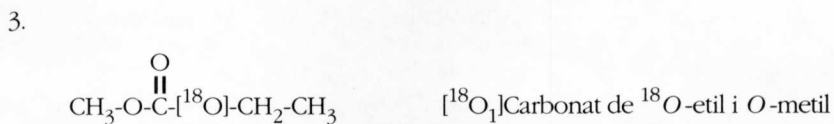
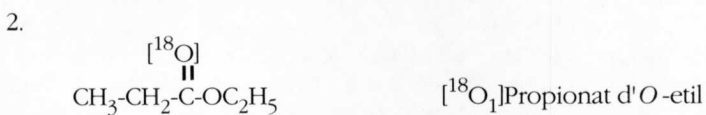
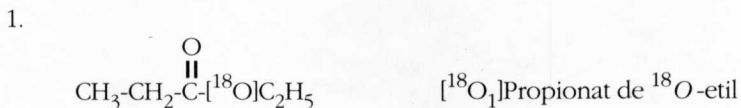
Àcid 3-(etil[3-³⁴S]trisulfonil)propioníc*

* Vegeu la regla C-515.2, pàg. 216 de la (ref. 6).

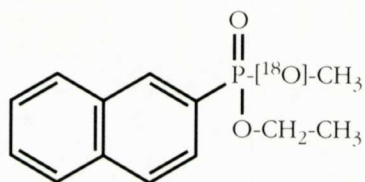


4.23- Per a distingir entre núclids diferents del mateix element poden ésser emprats com a localitzadors els símbols de núclids en cursiva i/o les lletres cursives majúscules.

Exemples:

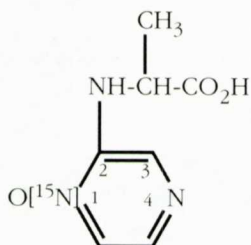


5.



2-Naftil¹⁸O₁]fosfonat
d'O-etil i ¹⁸O-metil

6.



¹⁵N-Oxid
d'N-([1-¹⁵N]-2-Pirazinil)alanina

REFERÈNCIES

1. I.U.P.A.C. Manual of Symbols and Terminology for Physicochemical Quantities and Units, Edició 1973, Butterworths, Londres, 1975, Regles 7.1 i 7.2 p. 24.
2. I.U.P.A.C. Commission on Atomic Weights, *Pure and Applied Chemistry*, 37, 591-603 (1974).
3. (a) W.A. Boughton, Naming Hydrogen Isotopes, *Science*, 79, 159-60 (1934); (b) E.J. Crane, Nomenclature of the Hydrogen Isotopes and Their Compounds, *Science*, 80, 86-9 (1934); (c) American Chemical Society, Report of Committee on Nomenclature, Spelling, and Pronunciation, Nomenclature of the Hydrogen Isotopes and Their Compounds, *Ind. Eng. Chem.* (News Ed), 13, 200-1 (1935).
4. «The Naming and Indexing of Chemical Substances for Chemical Abstracts During the Ninth Collective Period (1972-1976)», p220, p.1111, una separata de la Secció IV de la «Introduction to the Chemical Abstracts Volume 76 Index Guide».
5. I.U.P.A.C. Nomenclature of Inorganic Chemistry, 2nd Edition (1970), Butterworths, Londres, 1971: (a) Regla 1.31, p. 11; (b) Regla 1.1 p. 10.
6. Versió Catalana de les Regles de Nomenclatura de Química Orgànica de la I.U.P.A.C., Seccions, A, B i C. Edició a cura d'A. Messeguer i M.A. Pericàs. Institut d'Estudis Catalans i Consell Superior d'Investigacions Científiques. Barcelona, 1989.

APÈNDIX

Exemples comparats de fórmules i noms de composts modificats isotòpicament

Tipus de compost	Fórmula	Nom
No modificat	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$	Etanol
Substituit isotòpicament	$\text{C}^2\text{H}_3\text{-CH}_2\text{-O}^2\text{H}$	(2,2,2- $^2\text{H}_3$)Etan(^2H)ol o (O, 2,2,2- $^2\text{H}_3$)Etanol
Marcats específicament	$\text{C}[^2\text{H}_3]\text{-CH}_2\text{-O}[^2\text{H}]$	[2,2,2- $^2\text{H}_3$]Etan[^2H]ol o [O, 2,2,2- $^2\text{H}_3$]Etanol
Marcats selectivament	a. $[\text{O}, 2\text{-}^2\text{H}]\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$ b. $[2\text{-}^2\text{H}_{2,2}, \text{}^{18}\text{O}_{0,1}]\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$	a. [O,2- ^2H]Etanol b. [2- $^2\text{H}_{2,2}, \text{}^{18}\text{O}_{0,1}$]Etanol
Marcats no selectivament	$[\text{}^2\text{H}]\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$	[^2H]Etanol
Deficient isotòpicament	$[\text{def } ^{13}\text{C}]\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$	[<i>def</i> ^{13}C]Etanol