

SLOVENSKÁ CHEMICKÁ TERMINOLÓGIA

Poznámky k nomenklatúre organických voľných radikálov

E. BORSIG

*Ústav polymérov Slovenskej akadémie vied,
Bratislava*

Hoci organické voľné radikály sú vo väčšom meradle známe od začiatku dvadsiateho storočia, pričom prvé práce, poukazujúce na ich existenciu, datujú sa približne ešte o 100 rokov skôr [1, 2], doteraz nebola oficiálne vydaná nomenklatúra pre organické voľné radikály. Autori publikácií pri opisovaní reakčného mechanizmu, ktorého medzi-produktom sú voľné radikály, najčastejšie používajú nakreslené štruktúry medzi-produktov bez ich ďalšieho pomenovania, čo napokon je zvykom z praktických dôvodov aj pri iných chemických reakciách.

Atóm v molekule, na ktorom je nespárený elektrón, označuje sa v týchto štruktúrnych vzorcoch obvykle bodkou alebo sa používa aj hviezdička, prípadne krúžok (v staršej literatúre sa používala vodorovná čiarka, ktorá sa však súčasne používa na označenie chemickej väzby, a preto sa neskôr upustilo od takého označovania nespáreného elektrónu).

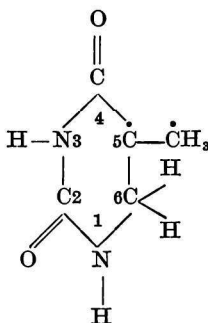
Ak je však potrebné odvodiť názov príslušného voľného radikálu, v tých najjednoduchších prípadoch sa obvykle vychádza z názvu substituenta alebo charakteristickej skupiny, na ktorej sa nachádza nespárený elektrón, ku ktorému sa pridá „radikál“ alebo „voľný radikál“. Napríklad $\bullet\text{OH}$ je hydroxylový radikál, $\bullet\text{CH}_3$ metylový radikál, $\text{CH}_3\bullet\text{O}$ metoxylový radikál, substituovaný metylový radikál s fenylovými skupinami $(\text{C}_6\text{H}_5)_3\text{C}$ je trifenylmetylový radikál a pod.

V literatúre sa už objavil aj nový návrh na pomenovanie radikálov, ktorý sa zakladá na označení polohy radikálu gréckym slovom „kenon“ (kenon = prázdny) [3]. Napríklad voľný radikál odvodený od kyseliny octovej $\bullet\text{CH}_2\text{COOH}$ by dostal názov kyselina kenon-octová (podobne ako substituovaná kyselina octová je napríklad kyselina chlór-octová). Radikál $\bullet\text{CH}_2\text{CH}_2\text{COOH}$ by sa nazýval kyselina 3-kenonpropiónová, $\bullet\text{C}_6\text{H}_4\text{—OH}$ je *p*-kenonfenol, $\bullet\text{CH}_3$ je kenonmetán.

Hoci tento návrh na pomenovanie voľných radikálov pomocou gréckeho slova „kenon“ by takisto vyhovoval presnému označeniu nespáreného elektrónu v štruktúre zlúčeniny, je málo pravdepodobné, že sa presadí proti dávno zaužívanému označeniu tejto skupiny látok ako voľné radikály. Preto sa zdá, že bude najsprávnejšie názvy radikálov prispôbiť doterajšej nomenklatúre pre organickú chémiu, ktorú vydal IUPAC r. 1961.

Pod takýmto prispôbením sa myslí, že pri odvodení názvu voľného radikálu so zložitou štruktúrou treba na označenie polohy nespáreného elektrónu využiť rovnaké spôsoby ako pri označení miesta funkčnej skupiny alebo substituenta v štruktúre organickej molekuly. V poslednom čase sa už použil takýto spôsob označenia polohy nespáreného elektrónu.

Napríklad názov v prípade radikálu



je 5-tymylový radikál [4] alebo $(C_6H_5)_3C\cdot CH_2$ je 2,2,2-trifenyletylový radikál [5], $(C_6H_5)_2\cdot CCH_2CH_3$ je 1,1-difenyl-1-propylový radikál [6], $CH_3\cdot CHCH_2CH_2CH_2CH=CH_2$ je 6-hepten-2-yllový radikál [7]. Z posledných príkladov vidieť, že tam, kde je to možné, je snaha pre polohu radikálu voliť čo najnižšie číslo numerických prefixov vzhľadom na ostatné substituenty.

Zo stručného zhrnutia súčasného stavu v názvosloví organických radikálov vyplýva, že pri odvodení názvu radikálu treba voliť, pokiaľ je to možné, funkčnú skupinu, na ktorej je voľný radikál, ako koncovku. Vtedy obvykle nie je potrebné osobitne označovať polohu voľného radikálu. V zložitejších molekulách je potrebné vyznačiť polohu radikálu takým spôsobom, ako je to zvykom pri označení funkčnej skupiny alebo nejakého iného substituenta v molekule.

LITERATÚRA

1. Gay-Lussac H. L., *Ann. Chim.* **95**, 172 (1815).
2. Bunsen R. H., *Ann. Chim.* **42**, 27 (1842).
3. Ericson L. G., Cutten D. R., *Bull. Chem. Soc. Japan* **40**, 2974 (1967).
4. Heller H. C., Schlick S., Cole T., *J. Phys. Chem.* **71**, 97 (1967).
5. Kaplan L., *J. Am. Chem. Soc.* **88**, 4531 (1966).
6. Borsig E., Lazár M., Čapla M., *Chem. zvesti* **20**, 430 (1966).
7. Brace N. O., *J. Org. Chem.* **32**, 2711 (1967).

Do redakcie došlo 5. 9. 1968