

Dysonov način označivanja organskih spojeva

Cerkovnikov, E.; Ljubić, R.

Source / Izvornik: **Farmaceutski glasnik, 1954, 10, 390 - 396**

Journal article, Published version

Rad u časopisu, Objavljena verzija rada (izdavačev PDF)

Permanent link / Trajna poveznica: <https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:163:506599>

Rights / Prava: [In copyright](#) / [Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2024-05-09**



Repository / Repozitorij:

[Repository of Faculty of Pharmacy and Biochemistry University of Zagreb](#)



Dysonov način označivanja organskih spojeva

(Iz Zavoda za organsku kemiju Farmaceutskog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu.)

U prijašnjem saopćenju (1) istakli smo uzroke, koji su rukovodili D y s o n a u traženju novog sistema za označivanje organskih supstancija, kao i važnost njegova prijedloga za rješavanje problema što kraćeg i preglednijeg prikazivanja njihove konstitucije. Međutim je njegov prvi prijedlog (2) imao u prvom redu za cilj da izazove diskusiju i konstruktivnu kritiku njegova sistema i da time pomogne autoru naći bolje putove za rješavanje postavljene problematike. Na temelju sugestija i kritičkih osvrta zainteresiranih iz čitavog svijeta Dyson daje svoj drugi prijedlog (3,4) sistema prikazivanja strukturnih formula. Taj se sistem u mnogome razlikuje od prvog, ali u njemu ostaje netaknut princip: strukturne se formule prikazuju pomoću linearno poredanih konvencionalnih slova i arapskih brojeva, te Dysonov sistem ostaje u biti i nadalje kemijskom stenografijom.

Mora se svakako spomenuti, da u novije doba postoji niz uspješnih pokušaja za pojednostavljenje načina prikazivanja struktura organskih spojeva. No Dysonov se sistem može smatrati mnogo logičnijim i jednostavnijim u usporedbi s drugim sistemima (5). Od osobite je vrijednosti njegov način numeriranja pojedinih elemenata u strukturnim formulama organskih supstancija.

U ovom saopćenju prikazan je u najkraćim crtama najnoviji Dysonov način prikazivanja strukture organskih spojeva. (Prema privatnom saopćenju Dyson ne namjerava više mijenjati svoj sistem, štoviše, sa svojim suradnicima već obrađuje »prema Dysonu« poznati priručnik organske kemije Beilstein, te ga namjerava i objelodaniti.)

A) OPERACIJE.

Dysonov je sistem podijeljen na devet operacija. Svakoj od njih odgovara određen logični smisao predstavljen posebnim konvencionim znakom:

- I. Simboli C, Q, S, N i t. d.;
- II. Ponavljanja: indeksi, A, B;
- III. Mjesto operacije: arapski broj;
- IV. Zasićenost H;
- V. Nezasićenost E;
- VI. Zamjena Z;
- VII. Cis-trans izomerija pri cikličkim spojevima L;
- VIII. Optička izomerija U;
- IX. Dopunski znakovi T, X, W.

I. Simboli elemenata.

Simboli elemenata ostaju uglavnom isti kao što su bili u prvom prijedlogu. Za kisik je upotrebljen znak »Q«, dok oznaka »O« ostaje isključivo za nulu.

II. Ponavljanje.

a) Broj, kojim se označuje ponavljanje ugljikova atoma u lancu zove se **modulanti**. On se piše kao indeks uz simbol atoma, koji se ponavlja:



b) Budući da element vodik posjeduje jednoznačnu valentnost, te se nalazi u određenim omjerima u izvjesnom nizu organskih spojeva, izostavlja se njegov simbol u formuli, a zasićeni se ugljikovodici označuju ovako:

metan C; etan C₂; propan C₃; butan C₄; i t. d.

c) Spomenuti se principi protežu i na ostale simbole:

—NH—NH (hidrazo) N₂; —O—O— (peroksi) O₂;

d) U cikličkim spojevima se grupa »CH₂« označuje slovom »A«, a grupa »CH« slovom »B«. Broj ovih grupa naglašava se pomoću arapskih brojeva, koji odgovaraju, a stavljaju se iza spomenutih slova:

ciklopropan A₃; cikloheksan A₆; benzen B₆; ciklooktatetraen B₈.

e) Za ponavljanje čitavih izraza služi grčko slovo Θ (theta). Prefiks bis- označuje se sa Θ_2 ; prefiks tris- sa Θ_3 ; prefiks tetraakis- Θ_4 i t. d. Na pr. difenil B Θ_2 ; trifenil B Θ_3 .

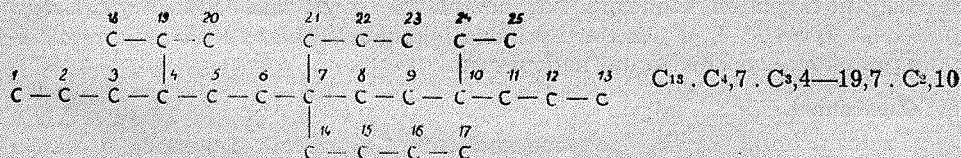
f) Policiklički spojevi s kondenziranim prstenima pišu se dosljedno gornjim pravilima: naftalen nije B₆₆ nego B₆₂; antracen B₆₃; pentacen B₆₅ i t. d.

III. Mjesto operacije.

a) Brojevi, koji označuju mjesto operacije zovu se **lokanti**. Od simbola se odjeljuju zarezom: 4-metiloktan C₈.C₄.

b) Numeriranje ugljikova lanca provodi se prema ovim pravilima:

1. Kao temeljni skelet uzima se ugljikov lanac s najvećim brojem ugljikovih atoma. Ugljici iz postranog lanca numeriraju se redom po modulantiima u padanju:



2. Ako dva simbola nisu vezana tako, da svaki od njih nosi najmanji broj u svom ugljikovu lancu, tada je potrebno da se posebno naglasi mjesto povezivanja pojedinih atoma na način, kao što je to učinjeno u gornjem primjeru: C₃,4—19.

3. Za početak najduljeg lanca odabere se takav kraj, da bi se za označivanje idućeg lanca mogao upotrebiti najmanji lokant. Na ispunjenje toga pravila treba gledati tek onda, kada je ispunjen drugi dio pravila III. b-1.

c) Za numeriranje i označivanje cikličkih sistema vrijede ova pravila:

1. Monociklički sistem numerira se uvijek od mjesta glavne operacije, t. j. od mjesta, gdje je supstituiran drugi prsten ili najdulji lanac.

2. Pri numeriranju ciklički sistem ima uvijek prednost pred lančastim.

3. Prednost imaju ciklički sistemi s većim brojem članova.

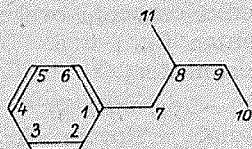
4. Policiklički spojevi s kondenziranim prstenovima imaju uvijek prednost pred monocikličkim:

5. Ovi se sistemi počinju numerirati uvijek na mjestu razgranjenja i to u smjeru ležanja zajedničkih bridova kondenziranih prstenova.

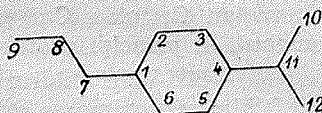
6. Kod označivanja se lokanti od citata odjeljuju zarezom.

7. Mjesto kondenzacije prstenova označuje se manjim lokantom i odjeljuje zarezom.

Kako pokazuju donji primjeri ovim se načinom pojednostavnjuje način numeriranja i označivanja i složenijih sistema:

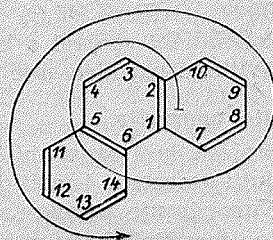
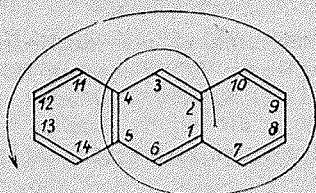


B6 . C¹ . C,8



A6 . C³,1,4—11

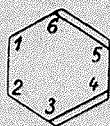
8. Numeriranje atoma u kondenziranim prstenovima mora teći uvijek spiralno u istom smjeru.



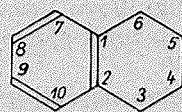
9. Ako je u grupi kondenziranih prstenova neki prsten zatvoren od drugih prstenova, koji su radi svoje veličine i položaja već prije numerirani, onda se ovaj novi prsten numerira bez obzira na smjer numeriranja prijašnjih prstenova (pravilo 8), a u smjeru porasta lokanata s obzirom na prije numerirane prstenove, na koje se oni nadovezuju.

IV. Zasićenost.

Prelazni oblici između potpuno zasićenih i nezasićenih prstenova označuju se najprije znakom onog prstena, kojem je prelazni oblik bliže, a zasićenje se naglašuje znakom elementa vodika »H«:



B6 . H,1,2



B6² . H,3,4,5,6

V. Nezasićenost.

a) Nazočnost dvostrukog veza označuje se znakom »E«. Ako je potrebno naglasiti cis- odnosno trans-položaj upotrebljava se oznaka E1, odnosno E2. Trostruki se vez naglašuje znakom E3.

Etilen: C² . E; pentin-2: C⁵ . E3,2; cis- i trans-buten-2: C⁴ . E1,2, odnosno C⁴ . E2,2; cikloheksen: A6 . E; 1-metilcikloheksen-2: A6 . C,1 . E,2.

b) Simbol »E« dolazi u formulama iza »C«.

c) Oznake iz toč. V-a imaju u formulama ovaj redosljed: E E1 E2 E3.

VI. Zamjena.

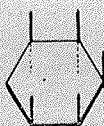
a) Operacija »zamjene« upotrebljava se pri označivanju heterocikličkih spojeva, te se bilježi slovom »Z«. U prikazivanju strukture heterociklusa uzima se kao matična supstancija odnosi ciklički ugljikovodik. Konvencionalnoj se oznaci, koja prikazuje strukturu tog ugljikovodika doda uz spomenuto slovo »Z« i kemijski simbol za heteroatom, koji se nalazi u prstenu, t. j. N, S i t. d. (osim kisika, koji se označuje sa Q). Slovo Z, oznaka heteroatoma, kao i brojevi, koji označuju njegov položaj u prstenu, stave se u formuli u zagradu (4): tetrahidrofuran A5(ZQ); furan B5(ZQ)H; piridin B6(ZN) tiofen B5(ZS)H.

b) Pri heterocikličkim spojevima s jednim heteroatomom numeriranje počinje od njega, sa dva heteroatoma numerira se najkraćim putem od jednog heteroatoma prema drugom (prednost ima onaj s manjom valencijom). Pri heterocikličkim spojevima s više kondenziranih prstenova numeriranje započinje uvijek na mjestu kondenzacije prstenova i nastoji da se usmjeri najkraćim putem do heteroatoma. Usto je potrebno pridržavati se spomenutih pravila pod toč. III-c-3.:

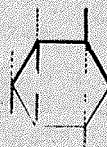
kinolin: B6*(ZN,3); izokinolin: B6*(ZN,4); piperazin: B6(ZN,1,4)

VII. Cis-trans izomerija pri cikličkim spojevima.

Položaj grupe ispod ravnine pisanja označuje se slovom »L«. Grupe iznad ravnine ne ističu se u formuli posebno:



A6 . C,1 (1) 5



A6 . C,1 (1) 5 . L,1,4

[1, (1) 5 označuje skraćeno prikazivanje brojeva 1, 2, 3, 4, 5.]

VIII. Optička izomerija.

Optička izomerija obilježava se znakom »U« i to uz jedan arapski broj, koji ima ovo značenje:

U1 desno zakretanje; U2 lijevo zakretanje; U3 racemat; U4 mezo-forma.

IX. Dopunski znakovi.

Simbol »T« naglašuje nenormalnost u valenciji elemenata: CT2 i CT3 označuju »dvo« i »trovalentni« C: trifenil metil: B6Q*CT3.

W označuje gubitak jedne molekule vode (na pr. u anhidridima kiselina).

X pokazuje zamjenu jednog ugljikova atoma s karboksilnom skupinom: C→COOH.

B) FUNKCIONALNE GRUPE.

1. Alkoholi; aldehidi, ketoni i karbonske kiseline.

Simbol Q upotrebljava se za naglašivanje hidroksilne grupe EQ1 za kisik u aldehydnoj grupi, EQ u ketonskoj grupi. Karboksilna skupina bilježi se oznakom Q:EQ. No radi kratkoće je uveden za tu grupu simbol »X«. Na pr.:

Etanol: C₂Q; propanol-2: C₃Q,2 (broj dva pokazuje mjesto —OH); glicerol: C₃Q, 1, 2, 3; acetaldehid: C₂.EQ1; propanon-2: C₃EQ,2; maslačna kiselina: C₄X; vinska kiselina C₄.X,1,4.Q,2,3; salicilna kiselina: B6.C.X,7.Q,2.

2. Derivati karbonskih kiselina.

a) Esteri.

Kod ovih je spojeva ugljikov lanac prekinut s funkcionalnom grupom, te se dosljedno već spomenutim pravilima najprije istakne lanac s većim brojem ugljikovih atoma, poslije toga funkcija (X), i napokon u zagradi oznaka za drugi ostatak:

Etilni ester propionske kiseline: $C_3X(C_2)$; dietilni ester oksalne kiseline: $C_2 \cdot X(C_2)_{1,2}$.

[Prema istom principu označuju se i eteri; na pr.: etilmetil eter: C^2QC ; dietil eter (C^2) $_2Q$.]

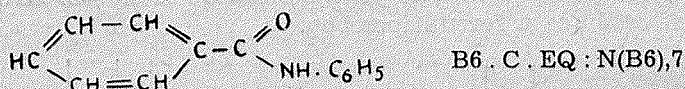
b) Anhidridi.

Za prikaz ovih spojeva služi znak »W«, na pr.: anhidrid octene kiseline: $(C_2X)_2W$.

c) Amidi.

Grupa $-C(=O)NH_2$ istakne se pomoću slova EQ:N, na pr.: amid maslačne kiseline: C:EQ:N.

Ako se radi o supstituiranom amidu, takav se spoj bilježi prema pravilima za označivanje estera:



d) Spojevi s dušikom.

Za označivanje ovih spojeva upotrebljavaju se ovi simboli: amino grupa N; nitrozo N1; nitro N2; azo grupa N4; na pr.: propil amin C⁺N; trimetil amin (C)⁺N; nitrozobenzen B6.N1; nitrobenzen B6.N2; azobenzen B6 $\ominus_2$ N4;

e) Spojevi sa sumporom.

Za naglašivanje sumpornih derivata služe ove oznake: sulfidi i tioalkoholi S; disulfidi S₂; sulfoksidi Sl; sulfoni S2; sulfonske kiseline S3;

butantiol-1 C₄S; dimetilsulfid (C)₂S; dimetildisulfid (C)₂S₂, etil sulfon (C₂)₂S₂; fenil sulfoksid B6.2Sl; etansulfonska kiselina: C₂S₃.

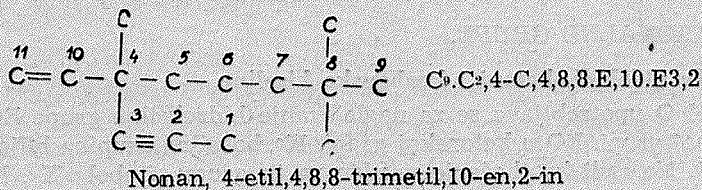
f) Halogenidi.

Halogeni elementi se u Dysonovim formulama istaknu pomoću uobičajenih kemijskih simbola (velika slova):

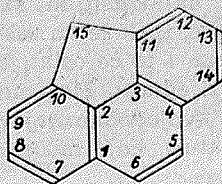
jodoform: C(J)₃; kloretan C₂.CL i t. d.

C) NOMENKLATURA.

Davanje imena organskim spojevima bazina Dyson na čitanju oznaka. Time je u cijelosti zadržana logika provedena pri označivanju, pa je tako odmah definiran i redoslijed nazivanja, na pr.:



Za nazivanje cikličkih sistema usvojen je Taylorov sistem, koji se odlikuje osobitom jednostavnošću. Znak »A« čita se sufiksom -lan, a znak »B« sufiksom -len. Veličinu ciklusa određujemo grčkim broječanim prefiksima: tria, tetra, penta, heksa, hepta, okta, nona, deka i t. d. Broj kondenziranih prstenova određuje se latinskim prefiksima: bini, terni, kvaterni, kvini, seni, septeni, oktoni, noveni, deni i t. d.



B6*5,1,3,10,H,15

1,3-Terniheksa, 10-pentalen, 15-hidro

Heteroatomi čitaju se upotrebom »A«-nomenklature: Piridin B6(ZN) Heksalen-aza. Furan, B5(ZQ.H) Pentalen, 1-oksa, 1-hidro; Terpeneol A6.C*,1-8.C,4.F,3.Q,8; Heksalan, 1-8-propil, 4-metil, 3-en, 8-ol.

(Internacionalno ime: 1-metil-4-izopropil-cikloheksen-8-ol.)

D) MEHANIČKA UPOTREBA.

Dysonov sistem omogućuje lagano i jednostavno svrstavanje organskih spojeva. Svakoj je oznaci dana određena brojevana konstanta. Sumiranjem ovih brojeva može se odmah odrediti bruto formula svakog organskog spoja. Izražavanje kemijskih formula u brojevima i njihovo prenošenje na posebne kartice omogućuje mehaničko sortiranje traženih spojeva pomoću poznatih kalkulatora tipa »Facit«, na pr. s istom bruto formulom, svrstavanje supstan- cija prema kemijskim funkcijama i t. d.

Tako na pr.

Konstante.

C 102; E-2; E3-4; H 1; N 1 000 001; Q 10 000; X 19 998;

Brojevana konstanta 2 i t. d. Na pr.:

glicerol C*,Q,1,2,3

C*(102.3) 306

Q 1,2,3 (10 000.3) 30000

Brojevana konstanta 2

30308

O₃ C₃ H₈ C₃H₈O₃

Zaključak

Iz kratkog prikaza Dysonova sistema vidi se njegova prednost pred drugim načinima označivanja, numeriranja, a i nazivanja organskih spojeva. Njegov je sistem logičan, strukturne se formule mogu jednostavno prikazati pomoću brojeva i slova, te se nakon toga može jednoznačno i logično dati ime spoju.

Potrebno je posebno istaknuti značaj načina numeriranja atoma u strukturnim formulama, jer je on jednostavan, logičan i nedvojbjen. Dysonove se formule mogu prema ključu provesti i u brojeve. Ovi se brojevi mogu prenijeti na kartice, koje se mogu i mehanički sortirati, već prema potrebi. Sve te prednosti daju nadu, da će Dysonov sistem prodrijeti u praksu. No premda se Dysonov prijedlog može smatrati najlogičnijim sistemom za prikazivanje strukture organskih spojeva sadašnjice, ipak je on zasada samo uspjeli pokušaj na području rješavanja toga problema. I to će ostati tako dugo, dok praksa ne pokaže njegovu prednost i realnu vrijednost. Možemo se nadati, da će, nakon objelodanjenja »Beilsteina«, koje je svojedobno najavio Dyson, njegov sistem zauzeti ono mjesto u svjetskoj literaturi, koje mu prema njegovoj vrijednosti i pripada.

Dyson's notation of organic compounds

By E. Cerkovnikov and R. Ljubić

Abstract

Dyson's new notation, enumeration and designation system of organic compounds is briefly described.

(Institute of Organic Chemistry Faculty of Pharmacy University Zagreb — Croatia.)

Literatura — References

- (1) Cerkovnikov i suradnici, Arhiv. kem. 20, 154—9 (1948).
- (2) Dyson, A New Notation and Enumeration system for organic compounds. — I. Edition Longmans — London (1947).
- (3) Dyson, II Edition (1949).
- (4) Proposed modifications of Dyson notation arising from IUPAC meeting of 1951 (priv. saopćenje Dysona).
- (5) Eckert, J. Chem. Ed. 24, 55 (1947).
- (6) Morgan, J. Chem. Ed. 24, 58 (1947).
- (7) King, J. Chem. Ed. 24, 61 (1947).
- (8) Cox, J. Chem. Ed. 24, 65 (1947).
- (9) Perry i suradnici, J. Chem. Ed. 24, 71 (1947).
- (10) Taylor, A Proposed System of Enumerative Nomenclature for Organic Ring Systems. Dow Chemical Co. U. S. A.

REFERATI

Galenska farmacija

ULOGA GLICIRICINSKE KISELINE PRI LIJEČENJU ULCUS PEPTICUM SA SUCUS LIQUIRITIAE [B. Büttner, Die Pharmazie 9, 725 (1953).]

Nizozemski liječnik F. E. Revers izvijestio je (N. T. v. G. 52, pag. 2338) o kliničkim ispitivanjima Sucus Liquiritiae, koji je oslobođen gliciricinske kiseline precipitacijom s kalcijem. Revers je opazio, da nijesu nastupili nikakvi edemi, dok su ostala spazmolitička svojstva kao i ljekovito djelovanje na čir u želucu.

Način pripreme: 1 kg Sucus Liquiritiae otopi se u 10 litara tople vode. Otopini se doda uz miješanje 500 ccm otopine kalcijeva klorida (1:2) i ostavi stajati 24 sata. Poslije toga se tamnosmeđa

tekućina odlije od svjetlijeg taloga i ispari odnosno ugusti na vodenoj kupelji. Dobivena pasta može se dozirati u prikladnom obliku izdavati za obično liječenje čira. Ovako priređen Sucus nije posve bez gliciricinske kiseline, jer primijenjena precipitacija ne uklanja kvantitativno gliciricinsku kiselinu. Stoga se može govoriti samo o Sucus Liquiritiae s malo gliciricinske kiseline, a ne bez gliciricinske kiseline. Takav Sucus Liquiritiae upotrebljava se uspješno pri liječenju želučanog čira. (Ref. B. Akačić).

Farmaceutska kemija

STUDIJE ALKALOIDA GLAVNICE
II. Alkaloidi sjevero-američke droge. [Gordon H. Svoboda, G. Shahovskoy, A. Thornton Oliver, Er-