

## ROZDZIAŁ P-8. ZWIĄZKI MODYFIKOWANE IZOTOPOWO

- P-80 Wprowadzenie
- P-81 Symbole i definicje
- P-82 Związki podstawione izotopowo
- P-83 Związki znakowane izotopowo
- P-84 Przykłady porównawcze wzorów i nazw związków zmodyfikowanych izotopami

### P-80 WPROWADZENIE

Rozdział niniejszy opisuje ogólne zasady nomenklatury związków organicznych, w których skład izotopowy nuklidów (odn. 12, 14 i 22) odbiega od występującego w naturze (dyskusja znaczenia „naturalny skład” w odn. 29). Przykłady izotopowych nuklidów atomu wodoru są podane w Tabeli 8.1. Rozdział P-8 wywodzi się z zaleceń z Części H w *Nomenklaturze Związków Organicznych* z 1979 r. (odn. 1) oraz z rozdziału R-8 *Przewodnika do nomenklatury związków organicznych. Zalecenia 1993* (2). Obecne zalecenia zastępują zarówno te z 1979 jak i z 1993 roku. Krótkie omówienie zwyczajów upowszechnionych w nazewnictwie biochemicznym można z kolei znaleźć w odnośniku 30.

Istnieje jeszcze jeden system stosowany do opisu związków modyfikowanych izotopowo. Jest on oparty na rozszerzeniu zasad proponowanych przez Boughtona (patrz odn. 31) do opisu związków zawierających izotopy wodoru i stosowany głównie w systemie *Chemical Abstracts Service Index Nomenclature* (odn. 32) do opisu podstawienia izotopowego, ale nie do znakowania izotopowego.

Ujednolicony system przedstawiony w niniejszych zaleceniach pozwala na rozpoznanie różnych typów modyfikacji izotopowych i dlatego został wybrany zamiast systemu opartego na zasadach Boughtona, które dotyczą wyłącznie związków podstawionych izotopowo.

### P-81 SYMBOLE I DEFINICJE

#### P-81 SYMBOLE NUKLIDÓW

Symbol dla oznaczenia nuklidu we wzorze i nazwie związku modyfikowanego izotopowo składa się z symbolu atomu danego pierwiastka i arabskiej liczby w pozycji lewego indeksu górnego wskazującego liczbę masową nuklidu (patrz IR-3.2, odn. 12).

#### P-81.1 SYMBOLE ATOMÓW

Symbole atomów użytych w symbolach nuklidów są podane w wydawnictwie IUPAC *Nomenclature of Inorganic Chemistry* (odn. 12). W symbolu nuklidu symbol atomu jest drukowany czcionką romańską, pozostawiając kursywę na lokanty literowe, jak to jest zwyczajowo przyjęte w nomenklaturze związków organicznych i opisane w P-14.1.

Dla izotopów wodoru takich jak prot, deuter i tryt, symbolami nuklidów są  $^1\text{H}$ ,  $^2\text{H}$  i  $^3\text{H}$ . Symbole D i T dla  $^2\text{H}$  i  $^3\text{H}$  odpowiednio, są stosowane, lecz nie wówczas, gdy w związku obecne są inne modyfikowane nuklidy, ponieważ może to powodować trudności w alfabetycznym uszeregowaniu symboli nuklidów w deskrypcji izotopowym. Chociaż symbole *d* i *t* były i są wciąż używane zamiast  $^2\text{H}$  i  $^3\text{H}$  w nazwach tworzonych zgodnie z systemem Boughtona (odn. 31), w żadnym jednak innym przypadku nie stosuje się małych liter jako symboli atomów. Tym samym, stosowanie *d* i *t* w nomenklaturze chemicznej, poza systemem Boughtona, nie jest zalecane.

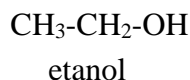
**P-81.3** NAZWY ATOMÓW I JONÓW WODORU (patrz odn. 30,33)**Tabela 8.1** Nazwy atomów i jonów wodoru

		<sup>1</sup> H	<sup>2</sup> H	<sup>3</sup> H	skład naturalny
<b>atom</b>	H	prot	deuter	tryt	wodór
<b>anion</b>	H <sup>-</sup>	protyd	deuteryd	trytyd	hydryd
<b>kation</b>	H <sup>+</sup>	proton	deuteron	tryton	hydron

**P-81.4** ZWIĄZKI IZOTOPOWO NIEZMODYFIKOWANE

Związek niezmodyfikowany izotopowo ma skład makroskopowy, wynikający z proporcji, w jakich jego składowe nuklidy występują w naturze. Wzór i nazwa związku są zapisywane w sposób zwyczajowy.

Przykłady:

**P-81.5** ZWIĄZKI IZOTOPOWO MODYFIKOWANE

Związek zmodyfikowany izotopowo ma skład makroskopowy, w którym stosunek izotopowy nuklidów, przynajmniej dla jednego pierwiastka, odbiega wymiennie od występującego w naturze. Izotopowo modyfikowane związki można podzielić na:

- (1) związki podstawione izotopowo
- (2) związki znaczone izotopowo

**P-82** ZWIĄZKI IZOTOPOWO PODSTAWIONE

P-82.0 Wprowadzenie

P-82.1 Wzory

P-82.2 Nazwy

P-82.3 Kolejność symboli nuklidów

P-82.4 Stereoizomeryczne związki podstawione izotopowo

P-82.5 Numeracja

P-82.6 Lokanty

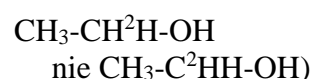
**P-82.0** WPROWADZENIE

Związek podstawiony izotopowo ma skład, w którym w zasadzie wszystkie cząsteczki związku mają tylko wskazany nuklid w każdej oznaczonej pozycji. Brak wskazanego nuklidu we wszystkich innych pozycjach oznacza, że skład izotopowy nuklidu jest taki sam jak w naturze.

**P-82.1** STRUKTURY

Strukturę związku podstawionego izotopowo opisuje się wzorem w zwykły sposób z tym wyjątkiem, że używa się właściwych symboli nuklidów. Wówczas, kiedy różne izotopy tego samego pierwiastka są obecne w tej samej pozycji, ich symbole wpisuje się w kolejności rosnących liczb masowych.

Przykłady

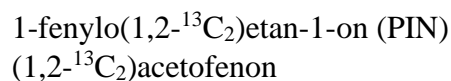
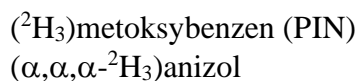
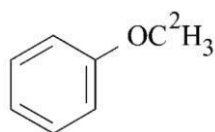
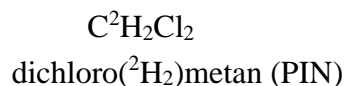
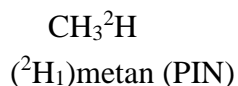
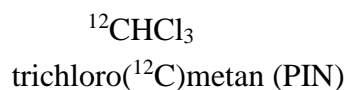
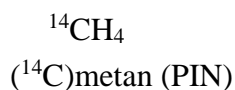
**P-82.2** NAZWY

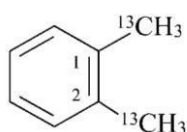
**P-82.2.1** Nazwę związku podstawionego izotopowo tworzy się poprzez dodanie lub wstawienie symbolu(i) nuklidu(ów) wziętego(ych) w nawias okrągły, poprzedzony koniecznym lokantem(ami), literowymi i/lub liczbowymi, przed fragmentem związku, który jest podstawiony izotopowo. Po nawiasach nie ma ani łącznika ani przerwy, z wyjątkiem przypadku, gdy nazwa lub jej część zawiera poprzedzający lokant, wówczas wstawia się łącznik. Wówczas, gdy dwa lub więcej symboli nuklidów pojawia się w tym samym miejscu nazwy, i jeśli jest to konieczne, to są one wymieniane najpierw w porządku alfabetycznym, a następnie w porządku ich liczb masowych (patrz P-82.3).

Kiedy możliwe jest wielokrotne podstawienie w pojedynczej pozycji, wówczas liczba podstawionych atomów jest zawsze określona indeksem dolnym z prawej strony symbolu(i) atomu(ów), nawet w przypadku pojedynczego podstawienia.

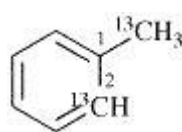
Wielokrotne podstawienie z izotopowo modyfikowanymi i niemodyfikowanymi atomami lub grupami opisano w P-82.2.2. Związki modyfikowane przedrostkiem hydro opisano w P-82.2.3.

Przykłady:

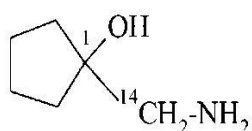
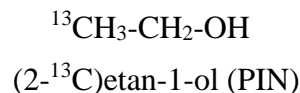
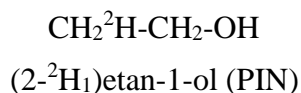




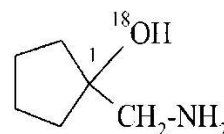
1,2-di[(<sup>13</sup>C)metylo]benzen (PIN)  
 (α,α'-<sup>13</sup>C<sub>2</sub>)-1,2-ksylen  
 (α,α'-<sup>13</sup>C<sub>2</sub>)-*o*-ksylen



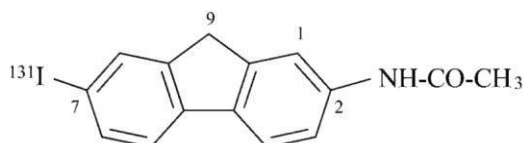
1-(<sup>13</sup>C)metylo(2-<sup>13</sup>C)benzen (PIN)  
 (α,2-<sup>13</sup>C<sub>2</sub>)-toluen



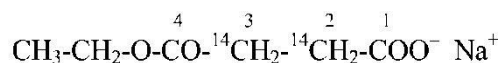
1-[amino(<sup>14</sup>C)metylo]cyklopentan-1-ol (PIN)



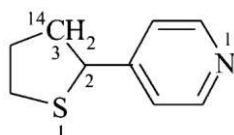
1-(aminometylo)cyklopentan-(1-<sup>18</sup>O)ol (PIN)



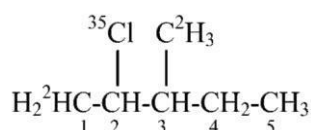
*N*-[(7-<sup>131</sup>I)jodo-9*H*-fluoren-2-ylo]acetamid (PIN)



4-etoksy-4-okso(2,3-<sup>14</sup>C<sub>2</sub>)butanian sodu  
 (2,3-<sup>14</sup>C<sub>2</sub>)butanodian etylu-sodu  
 (2,3-<sup>14</sup>C<sub>2</sub>)bursztynian etylu-sodu



4-[3-<sup>14</sup>C]tiolan-2-ylo]pirydyna (PIN)  
 4-[tetrahydro(3-<sup>14</sup>C)tiofen-2-ylo]pirydyna



2-(<sup>35</sup>Cl)chloro-3-(<sup>2</sup>H<sub>3</sub>)metylo(1-<sup>2</sup>H<sub>1</sub>)pentan (PIN)

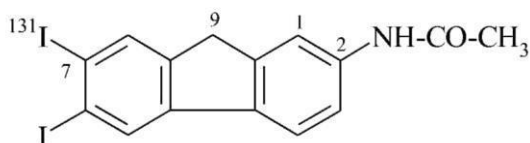
**P-82.2.2** Nazwa związku modyfikowanego izotopowo może różnić się od nazwy analogu bez modyfikacji wówczas, kiedy struktura zawiera identyczne fragmenty, które nie są identycznie modyfikowane w odpowiednich pozycjach. Tak różniące się grupy wymienia się oddzielnie.

Identycznie izotopowo modyfikowane atomy lub grupy, które nie są jednak identycznie modyfikowane w równoważnych pozycjach, wymienia się odrębnie, co stanowi zmianę w porównaniu z Częścią H Zaleceń z 1979 r. (odn. 1) i rozdziałem R-8 Zaleceń z 1993 r. (odn. 2).

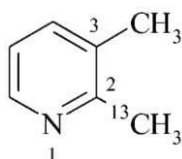
### P-82.2.2.1 Różne modyfikacje izotopowe podstawników skądinąd identycznych

Kiedy dwie grupy podstawników są modyfikowane izotopowo w różny sposób tak, że nie mogą być rozpatrywane łącznie poprzez użycie określeń zwielokrotniających takich jak „di-”, „bis-”, etc., to wymienia się je odrębnie. Preferuje się alfabetycznie podstawnik modyfikowany izotopowo w stosunku do podstawnika niemodyfikowanego.

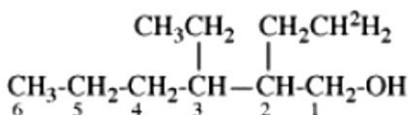
Przykłady:



*N*-[7-(<sup>131</sup>I)jodo-6-jodo-9*H*-fluoren-2-yl]o]acetamid



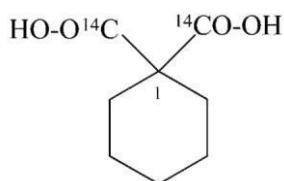
2-(<sup>13</sup>C)metylo-3-metylopirydyna (PIN)  
(nie 2,3-(2-<sup>13</sup>C)dimetylopirydyna)



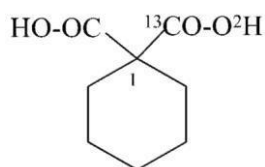
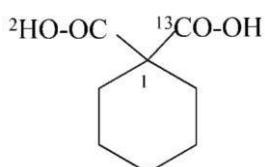
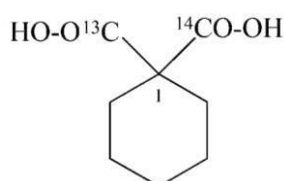
2-(2,2-<sup>2</sup>H<sub>2</sub>)etylo-3-etyloheksan-1-ol (PIN)

**P-82.2.2.2** Kiedy dwie grupy charakterystyczne są modyfikowane izotopowo w różny sposób, tak że nie mogą być łączone poprzez użycie przedrostków zwielokrotniających takich jak „di-”, „bis-”, etc., wówczas grupa charakterystyczna modyfikowana izotopowo z większą liczbą modyfikacji jest wybierana jako główna grupa charakterystyczna wyrażana przyrostkiem, a inna grupa charakterystyczna jest wówczas wskazywana przedrostkiem. Jeśli potrzebny jest dalszy wybór, wówczas przyrostek z nuklidem o wyższej liczbie atomowej jest wybierany jako główna grupa charakterystyczna podawana w przyrostku.

Przykłady:



kwas cykloheksano-1,1-di(<sup>14</sup>C)karboksylowy (PIN)

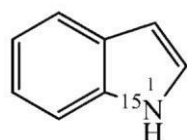
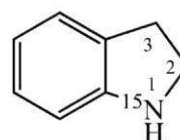
kwas 1-karboksycykloheksano-1-(<sup>13</sup>C)karboksylowy (PIN)kwas 1-(<sup>2</sup>H)karboksycykloheksano-1-(<sup>13</sup>C)karboksylowy (PIN)kwas 1-(<sup>13</sup>C)karboksycykloheksano-1-(<sup>14</sup>C)karboksylowy (PIN)

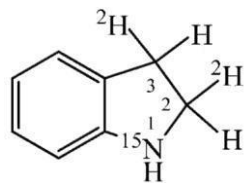
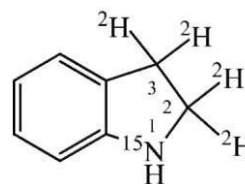
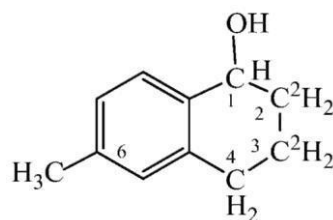
### P-82.2.3 Dodawanie przedrostków hydro

Modyfikowane izotopowo atomy wodoru, jeśli są obecne, to są zawsze związane ze szkieletem związku modyfikowanego izotopowo. Zgodnie z P-82.2.2, przedrostki hydro muszą być identyczne, zarówno w niemodyfikowanym jak i izotopowo modyfikowanym, i dodawane parami. Izotopowo modyfikowane i niemodyfikowane przedrostki hydro dodaje się jako rozłączne przedrostki podstawnikowe umieszczane przed nazwą macierzystego wodorku.

W niniejszych zaleceniach uwodorniony układ pierścieniowy mancade jest traktowany jak to opisano w P-82.2.2, co stanowi zmianę w porównaniu z wcześniejszymi zaleceniami.

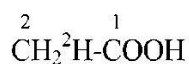
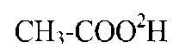
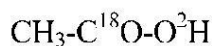
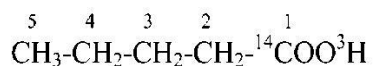
Przykłady:

<sup>15</sup>N)-1*H*-indol (PIN)2,3-dihydro(<sup>15</sup>N)-1*H*-indol (PIN)

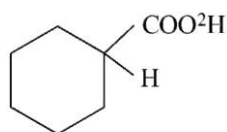
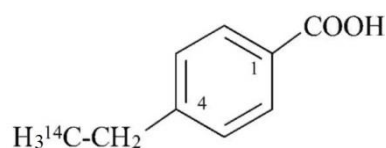
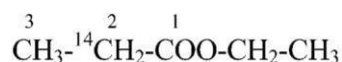
2,3-dihydro(2,3-<sup>2</sup>H<sub>2</sub>, <sup>15</sup>N)-1*H*-indol (PIN)2,3-di[(<sup>2</sup>H)hydro](2,3-<sup>2</sup>H<sub>2</sub>, <sup>15</sup>N)-1*H*-indol (PIN)  
[nie (2,3-<sup>2</sup>H<sub>2</sub>)dihydro(2,3-<sup>2</sup>H<sub>2</sub>, 1-<sup>15</sup>N)-1*H*-indol]6-metylo-2,3-di[(<sup>2</sup>H)hydro]-1,4-dihydro(2,3-<sup>2</sup>H<sub>2</sub>)naftalen-1-ol (PIN)  
{nie 6-metylo-1,4-dihydro-2,3-di[(<sup>2</sup>H)hydro](2,3-<sup>2</sup>H<sub>2</sub>)naftalen-1-ol;  
nie 6-metylo-[(2,3-<sup>2</sup>H<sub>2</sub>)-1,2,3,4-tetrahydro](2,3-<sup>2</sup>H<sub>2</sub>)naftalen-1-ol;  
te nazwy nie spełniają zalecenia P-82.2.2}

W nazwie składającej się z dwóch lub więcej wyrazów, deskryptor izotopowy umieszcza się przed odpowiednim wyrazem lub częścią wyrazu opisującą nuklid(y) chyba, że oczywiste lokanty są dostępne lub zbyteczne.

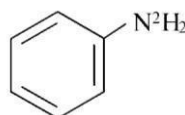
Przykłady:

kwas (2-<sup>2</sup>H<sub>1</sub>)octowy (PIN)kwas (*O*-<sup>2</sup>H)octowy (PIN)  
(<sup>2</sup>H)kwas octowykwas (*O*-<sup>2</sup>H, <sup>18</sup>O)octowy (PIN)kwas (<sup>18</sup>*O*-<sup>2</sup>H, <sup>18</sup>O)octowy (PIN)kwas (1-<sup>14</sup>C)pentan(<sup>3</sup>H)owy (PIN)

(14C)mrówczan sodu (PIN)

kwas cykloheksano(<sup>2</sup>H)karboksylowy (PIN)kwas 4-(2-<sup>14</sup>C)etylobenzoowy (PIN)propionian (1-<sup>14</sup>C)etylu (PIN)(2-<sup>14</sup>C)propionian etylu

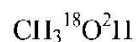
**P-82.2.5** W nazwie składającej się z jednego wyrazu, deskryptor izotopowy z odpowiednim lokantem umieszcza się przed nazwą. Tę metodę preferuje się w porównaniu z metodą umieszczającą deskryptor przed domniamaną nazwą grupy charakterystycznej.

(N-<sup>2</sup>H<sub>1</sub>)acetamid (PIN)(N-<sup>2</sup>H<sub>2</sub>)anilina (PIN)  
(N-<sup>2</sup>H<sub>2</sub>)benzenoamina

### P-82.3 KOLEJNOŚĆ SYMBOLI NUKLIDÓW

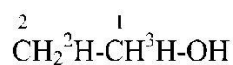
**P-82.3.1** Kiedy izotopy różnych pierwiastków są obecne jako nuklidy w związkach podstawionych izotopowo, wówczas ich symbole szereguje się w porządku alfabetycznym, o ile znajdują się w tym samym miejscu nazwy.

Przykład:

metan(<sup>2</sup>H, <sup>18</sup>O)ol (PIN)

**P-82.3.2** Kiedy kilka izotopów tego samego pierwiastka występuje jako nuklidy w izotopowo podstawionym związku, wówczas ich symbole rozmieszcza się w kolejności wzrastających liczb masowych, o ile nuklidy znajdują się w tym samym miejscu w nazwie.

Przykład:

(2-<sup>2</sup>H<sub>1</sub>, 1-<sup>3</sup>H<sub>1</sub>)etan-1-ol (PIN)



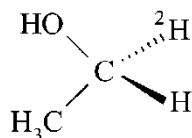
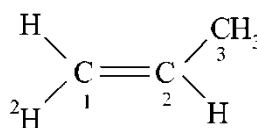
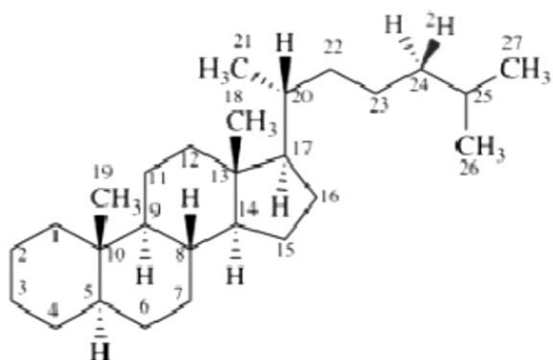
**P-82.4** PODSTAWIONE IZOTOPOWO ZWIĄZKI STEROIZOMERYCZNE

Możliwe są dwa typy związków stereoizomerycznych podstawionych izotopowo.

- (1) takie, w których stereoizomeria wynika z modyfikacji izotopowej;
- (2) takie, których niezmodyfikowane analogi same są stereoizomerami.

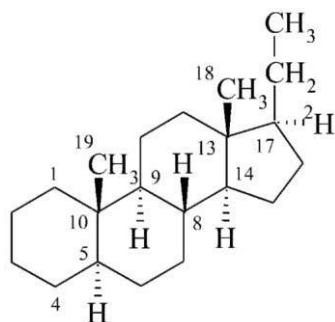
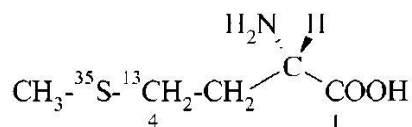
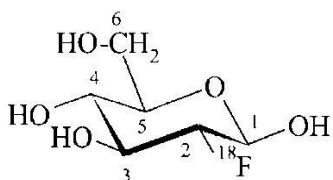
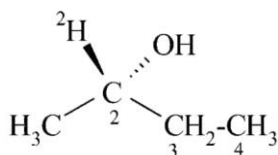
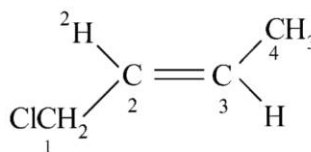
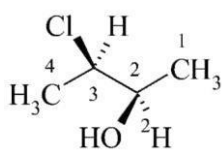
Nomenklatura związków podstawionych izotopowo wynika bezpośrednio z ogólnych metod opisanych w rozdziale P-9.

Stereodeskryptory umieszczają się w odpowiednich miejscach w nazwie stosownie do reguł stereochemicznych. Kiedy stereodeskryptory muszą być wstawione w nazwę w to samo miejsce co deskryptory izotopowe, jako pierwsze wymienia się stereodeskryptory.

**P-82.4.1** Przykłady, w których stereoizomeria jest wynikiem podstawienia izotopowego(1*R*)-(1-<sup>2</sup>H<sub>1</sub>)etanol (PIN)(1*E*)-(1-<sup>2</sup>H<sub>1</sub>)prop-1-en (PIN)(24*R*)-5α-(24-<sup>2</sup>H<sub>1</sub>)cholestan**P-82.4.2** Przykłady stereoizomerów podstawionych izotopowo

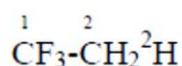
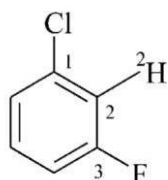
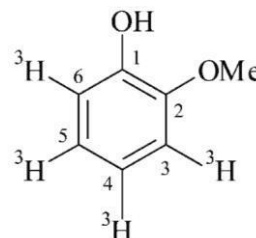
Afiksy stereochemiczne (np. D i L) dodaje się zgodnie z regułami odpowiednich klas, takich jak węglowodany, aminokwasy, steroidy, etc., opisanych w P-10; zwykle odnoszą się one do związku macierzystego (lub związku niezmodyfikowanego) zgodnie z daną klasą związków. W tych klasach deskryptory izotopowe mogą występować za deskryptorami stereochemicznymi, zgodnie ze zwyczajami biochemicznymi (odn. 30).

Przykłady:

5α-(17-<sup>2</sup>H<sub>1</sub>)pregnan1-(4-<sup>13</sup>C,<sup>35</sup>S)metionina2-deoksy-2-(<sup>18</sup>F)fluoro-β-D-glukopiranoza(2*S*)-(2-<sup>2</sup>H<sub>1</sub>)butan-2-ol (PIN)(2*E*)-1-chloro(2-<sup>2</sup>H<sub>1</sub>)but-2-en (PIN)(2*R*,3*R*)-3-chloro(2-<sup>2</sup>H<sub>1</sub>)butan-2-ol (PIN)**P-82.5** NUMEROWANIE**P-82.5.1** Numeracja w porównaniu ze związkami niemodyfikowanymi

Numeracja związku modyfikowanego izotopowo nie zmienia się w porównaniu ze związkiem niemodyfikowanym. Pośród cech strukturalnych związku, które należy rozważać kolejno, w numeracji, jak podano w P-14.4, obecność nuklidów rozważa się na końcu, z wyjątkiem chiralności wynikającej z podstawienia izotopowego.

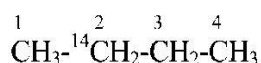
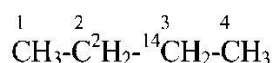
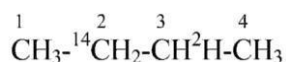
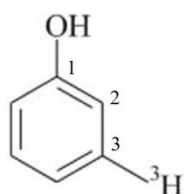
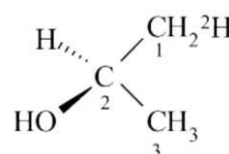
Przykłady:

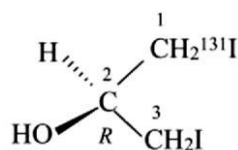
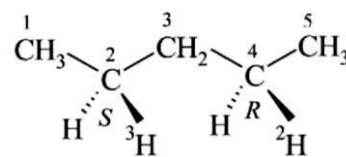
1,1,1-trifluoro(2- ${}^2\text{H}_1$ )etan (PIN)1-chloro-3-fluoro(2- ${}^2\text{H}_1$ )benzen (PIN)2-metoksy(3,4,5,6- ${}^3\text{H}_4$ )fenol (PIN)

**P-82.5.2** Pierwszeństwo pomiędzy izotopowo podstawionymi i niepodstawionymi atomami lub grupami

Kiedy istnieje wybór pomiędzy równoważnymi numeracjami w związku niemodyfikowanym izotopowo, wówczas początek i kierunek numeracji analogów związku podstawionego izotopowo wybiera się tak, by przypisać najniższe lokanty modyfikowanym atomom lub grupom rozważanym razem w jednej serii, w kolejności wzrastających numerów. Jeśli dalej pozostaje wybór, to pierwszeństwo najniższego lokantu przysługuje nuklidowi z wyższą liczbą atomową. W przypadku różnych nuklidów tego samego pierwiastka pierwszeństwo przysługuje nuklidom o wyższej liczbie masowej.

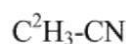
Przykłady:

(2- ${}^{14}\text{C}$ )butan (PIN)  
[nie (3- ${}^{14}\text{C}$ )butan](3- ${}^{14}\text{C}$ ,2,2- ${}^2\text{H}_2$ )butan (PIN)  
[nie (2- ${}^{14}\text{C}$ ,3,3- ${}^2\text{H}_2$ )butan](2- ${}^{14}\text{C}$ ,3- ${}^2\text{H}_1$ )butan (PIN) [nie (3- ${}^{14}\text{C}$ ,2- ${}^2\text{H}_1$ )butan](3- ${}^3\text{H}$ )fenol (PIN)(2R)-(1- ${}^2\text{H}_1$ )propan-2-ol (PIN)

(2*R*)-(1-<sup>131</sup>I)jodo-3-jodopropan-2-ol (PIN)(2*S*,4*R*)-(4-<sup>2</sup>H<sub>1</sub>,2-<sup>3</sup>H<sub>1</sub>)pentan (PIN)**P-82.6** LOKANTY**P-82.6.1** Pominięcie lokantów (patrz także P-14.3.4)

**P-82.6.1.1** W preferowanych nazwach IUPAC pomija się lokanty wówczas, kiedy nie są one niezbędne w niezmodyfikowanych nazwach. Jednakże, jeśli modyfikacja izotopowa wymaga lokantów wskazujących jej pozycję, wówczas muszą być podane wszystkie lokanty i żaden nie może być pominięty.

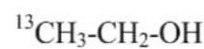
Przykłady:



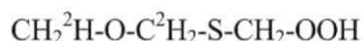
(<sup>2</sup>H<sub>3</sub>)acetonitryl (PIN)  
(tak jak w trichloroacetonitrylu)



etan(<sup>2</sup>H)ol (PIN)  
(jak w etanolu)



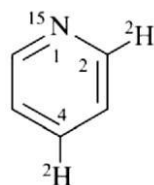
(2-<sup>13</sup>C)etan-1-ol  
[nie (2-<sup>13</sup>C)etanol]



{[(<sup>2</sup>H<sub>1</sub>)metoksy(<sup>2</sup>H<sub>2</sub>)metylo]sulfanylo}metanoperoksol (PIN)

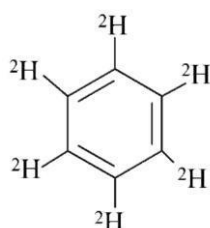
**P-82.6.1.2** Lokanty opuszcza się wówczas, gdy jest tylko jeden atom danego pierwiastka.

Przykład:

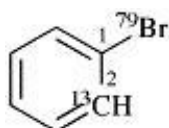
(2,4-<sup>2</sup>H<sub>2</sub>,<sup>15</sup>N)pyrydyna (PIN)

**P-82.6.1.3** Lokanty pomija się w związkach lub grupach podstawników, w których wszystkie pozycje są całkowicie izotopowo podstawione lub zmodyfikowane w ten sam sposób.

Przykład:

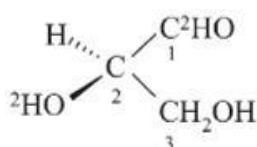
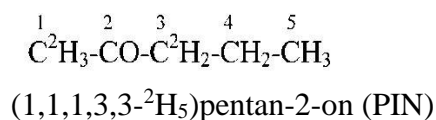
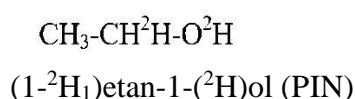
 $(^2\text{H}_6)$ benzen (PIN)**P-82.6.1.4** Lokantów nie pomija się, gdy możliwe są izomery.

Przykład:

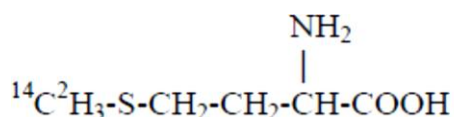
1-( $^{79}\text{Br}$ )bromo(2- $^{13}\text{C}$ )benzen (PIN)**P-82.6.2** Literowe i/lub liczbowe lokanty

Kiedy lokanty są potrzebne dla określenia struktury macierzystej lub jej fragmentu, zdefiniowanego za pomocą nawiasów, wówczas należy podać wszystkie lokanty dla struktury macierzystej lub tego fragmentu. Właściwe pozycje nuklidów muszą być wskazane w deskryptorach izotopowych odpowiednimi lokantami, litery i/lub liczby, poprzedzające symbol(e) nuklidu(ów). W preferowanych nazwach wszystkie lokanty umieszcza się przed symbolem multiplikowanego nuklidu.

Przykłady:

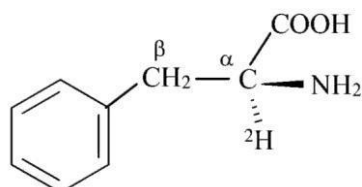
(2R)-2-( $^2\text{H}$ )hydroksy-3-hydroksy(1- $^2\text{H}$ )propanal (PIN)  
aldehyd D-(2-O,1- $^2\text{H}_2$ )glicerynowy**P-82.6.3** Wskazywanie lokantami nuklidów w pozycjach, których normalnie nie określa się lokantami**P-82.6.3.1** Kiedy nuklid zajmuje nie numerowaną pozycję, wówczas do wskazania jego pozycji można użyć przedrostka pisanego kursywą lub greckiej litery.

Przykłady:

D,L-*metrylo*-( $^{14}\text{C}$ , $^2\text{H}_3$ )metionina

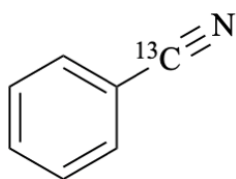


L-(karboamidoilo- C,N - N)arginina  
 L-(amidyno-<sup>14</sup>C,N'-<sup>15</sup>N)arginina  
 L-(guanidyno-<sup>14</sup>C,N'-<sup>15</sup>N)arginina  
 (patrz reguła H-4.2.1 odn.1)

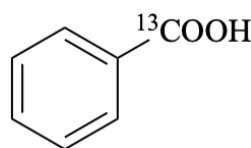


L-( $\alpha$ -<sup>2</sup>H)fenyloalanina

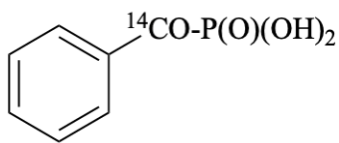
**P-82.6.3.2** Gdy nuklid znajduje się w pozycji, która nie jest numerowana w zachowanej nazwie, systematyczna nazwa określająca osobno odnośny atom jest używana w preferowanych nazwach IUPAC. W nomenklaturze ogólnej do wskazania jego pozycji może być użyty przedrostek pisany italią albo Grecka litera.



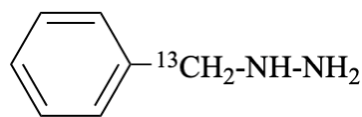
benzeno(<sup>13</sup>C)karbonitryl (PIN)  
 (cjano-<sup>13</sup>C)benzonitryl



kwask benzeno(<sup>13</sup>C)karboksylowy (PIN)  
 kwas (karboksyl-<sup>13</sup>C)benzosowy



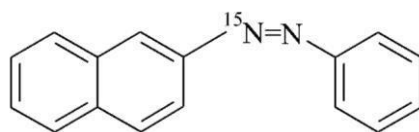
kwask [benzeno(<sup>14</sup>C)karbonylo]fosfonowy (PIN)?  
 kwas [fenylo(<sup>14</sup>C)karbonylo]fosfonowy  
 kwas (karbonylo-<sup>14</sup>C)benzoilofosfonowy



[fenylo(<sup>13</sup>C)metylo]hydrazyna (PIN)  
 [( $\alpha$ -<sup>13</sup>C)benzylo]hydrazyna

**P-82.6.3.3** Jeśli nuklid zajmuje nie numerowaną pozycję, lub kiedy jego pozycja nie może być łatwo zdefiniowana zgodnie z **P-82.6.3.1**, wówczas symbol nuklidu jest włączany do symbolu całej grupy, wskutek czego jest połączony z głównym fragmentem struktury. Reguła ta jest użyteczna w nomenklaturze ogólnej, w której wiele nazw konstruuje się bez lokantów.

Przykłady:



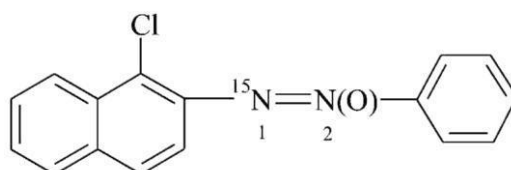
1-(naftalen-2-ylo)-2-fenyl(1-<sup>15</sup>N)diazen (PIN)  
 naftaleno-2-(<sup>15</sup>N=N)azobenzen



1-propylideno(1-<sup>15</sup>N)hydrazyna (PIN)  
 (<sup>15</sup>N-NH<sub>2</sub>)hydrazon propanalu



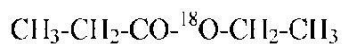
kwas 3-[etylo(2-<sup>34</sup>S)trisulfanylo]propanowy (PIN)  
 kwas 3-[etylo(S-<sup>34</sup>S-S)tritio]propionowy [patrz Reguła H-4.2.2, (1)]



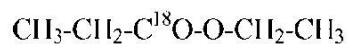
2-oksyl 1-(1-chloronaftalen-2-ylo)-2-fenyl(1-<sup>15</sup>N)diazenu  
 1-chloro-2-(fenyl-ON<sup>15</sup>N-azoksy)naftalen

**P-82.6.4** Pisane kursywą symbole nuklidów i/lub pisane kursywą wielkie litery, stosuje się dla odróżnienia różnych nuklidów tego samego pierwiastka.

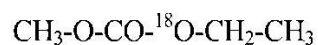
Przykłady:



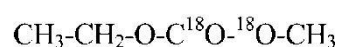
propan(<sup>18</sup>O<sub>1</sub>)ian <sup>18</sup>O-etylu (PIN)



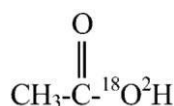
propan(<sup>18</sup>O<sub>1</sub>)ian *O*-etylu (PIN)



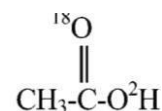
(<sup>18</sup>O<sub>1</sub>)karbonian <sup>18</sup>O-etylu-*O*-metylu (PIN)



(<sup>18</sup>O<sub>2</sub>)karbonian *O*-etylu-<sup>18</sup>O-metylu (PIN)



kwask ( $^{18}\text{O}$ - $^2\text{H}$ ,  $^{18}\text{O}$ )octowy



kwask ( $\text{O}$ - $^2\text{H}$ ,  $^{18}\text{O}$ )octowy (PIN)  
( $^{18}\text{O}$  jest deskryptorem izotopowym,  
a  $\text{O}$  jest lokantem)

### P-83 ZWIĄZKI IZOTOPOWO ZNACZONE

Związekznaczony izotopowo jest mieszaniną związku niezmodyfikowanego z jednym lub więcej analogów związku(ów) podstawionych izotopowo.

Chociaż związekznaczony izotopowo jest w istocie mieszaniną, jeśli chodzi o skład chemiczny (taki sam jak w związku niezmodyfikowanym), to jednak dla potrzeb nomenklatury, takie mieszaniny są nazywane „izotopowoznaczonymi” związkami.

- P-83.1 Związki specyficznieznaczone
- P-83.2 Związki selektywnieznaczone
- P-83.3 Związki nieselektywnieznaczone
- P-83.4 Związki izotopowo zubożone
- P-83.5 Znakowanie ogólne i równomierne

#### P-83.1 ZWIĄZKI SPECYFICZNIE ZNACZONE

Izotopowoznaczony związek jest uważany za ‘specyficznieznaczony’ wówczas, kiedy związek podstawiony izotopowo, jest formalnie dodany do związku będącego jego niemodyfikowanym izotopowo analogiem. W takim przypadku, definiuje się zarówno pozycję(e) jak i liczbę nuklidów.

Struktury (patrz P-83.1.1) są identyczne z tymi podanymi w P-82 dla związków podstawionych izotopowo, z wyjątkiem nawiasów zawierających symbol nuklidu.

Przykłady:

Związek podstawiony izotopowo	dodany do	izotopowo niezmodyfikowanego związku	prowadzi do utworzenia	związku specyficznieznaczonego
$^{13}\text{CH}_4$		$\text{CH}_4$		$[^{13}\text{C}]\text{H}_4$
$\text{CH}_2^2\text{H}_2$		$\text{CH}_4$		$\text{CH}_2[^2\text{H}_2]$

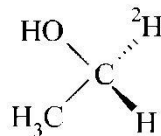
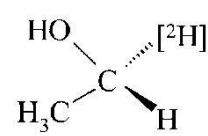
##### P.83.1.1 Wzory specyficznieznaczonych związków

Wzór strukturalny związku specyficznieznaczonego zapisuje się w zwykły sposób, lecz z symbolem(ami) odpowiednich nuklidów i z wielokrotniąjącym dolnym indeksem podanymi w nawiasie kwadratowym, [ ]. Wzór strukturalny zapisuje się w ten sam sposób jak wzór związku podstawionego izotopowo.



Chociaż wzór związku specyficznie znaczonego nie odpowiada składowi całego materiału, który zwykle składa się w większości ze związku izotopowo niezmodyfikowanego, to jednak wskazuje obecność ważnego składnika, jakim jest związek podstawiony izotopowo.

Przykłady:

Wzory związków podstawionych izotopowo	Wzory związków specyficznie znaczonych izotopowo
$\text{CH}_3\text{-CO-NH}^2\text{H}$ 	$\text{CH}_3\text{-CO-NH}[^2\text{H}]$ 
$\text{C}^2\text{H}_3\text{-CO-C}^2\text{H}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_3$	$\text{C}[^3\text{H}_3]\text{-CO-C}[^2\text{H}_2]\text{-CH}_2\text{-CH}_3$

Specyficznie znaczony izotopowo związek jest:

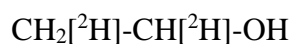
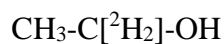
(a) pojedynczo znaczony wówczas, gdy związek podstawiony izotopowo ma tylko jeden atom zmodyfikowany izotopowo;

Przykład:



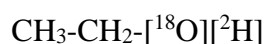
(b) wielokrotnie znaczony wówczas, gdy związek podstawiony izotopowo ma więcej niż jeden zmodyfikowany atom tego samego pierwiastka w tej samej lub w różnych pozycjach;

Przykłady:



(c) znaczenie w sposób mieszany wówczas, gdy związek podstawiony izotopowo ma więcej niż jeden rodzaj zmodyfikowanych atomów;

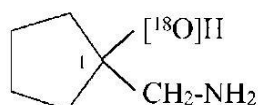
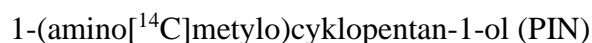
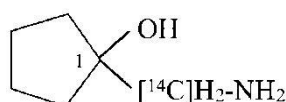
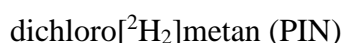
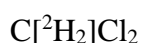
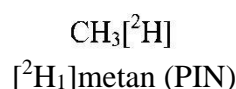
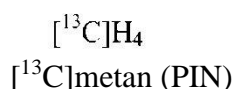
Przykład:



**P-83.1.2** Nazwy związków specyficznie znaczonech

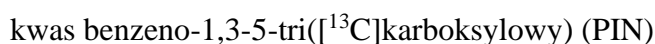
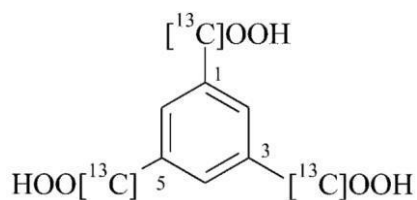
**P-83.1.2.1** Nazwę związku specyficznie znaczonego tworzy się dodając lub wstawiając w nawias kwadratowy, [ ], symbolu(i) nuklidu(ów) poprzedzonego(ych) niezbędnymi lokantami, przed określeniem fragmentu związku zmodyfikowanego izotopowo. Kiedy możliwe jest znaczenie wielokrotne, wówczas liczba atomów, które zostały znaczone musi być wyszczególniona poprzez indeks dolny symbolu atomu, nawet wtedy, gdy znaczone jest tylko jeden atom. Jest to niezbędne z uwagi na rozróżnienie pomiędzy specyficznie i selektywnie lub nieselektywnie znaczoneym związkiem.

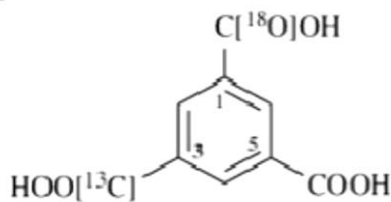
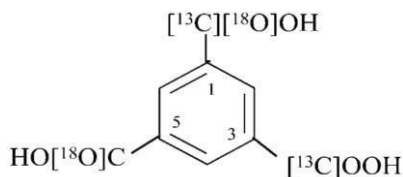
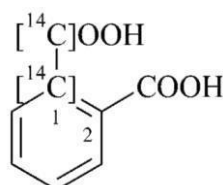
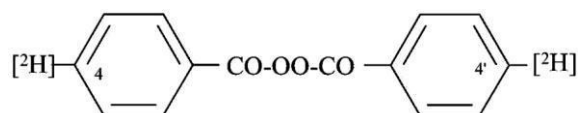
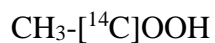
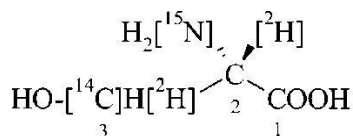
Przykłady:

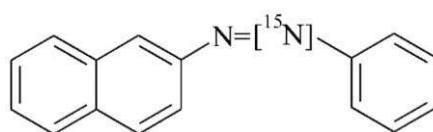


**P-83.1.2.2** Wszystkie reguły podane w P-82 mówiące o tym, jak budować nazwę związku podstawionego izotopowo, można stosować w budowie nazw związków specyficznie znaczonech, z wyjątkiem tego, że deskryptor izotopowy umieszcza się w nawiasie kwadratowym, a nawias okrągły obejmuje kompleksowe przedrostki. Na przykład geminalne kwasy dikarboksyłowe, patrz P-82.2.2.2.

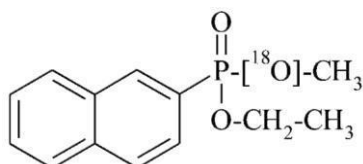
Przykłady:



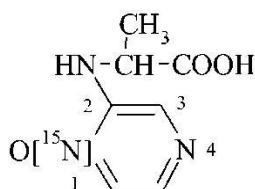
kwas 3- $^{13}\text{C}$ ]karboksy-5-karboksybenzeno-1- $^{18}\text{O}$ ]karboksylowy (PIN)kwas 3- $^{13}\text{C}$ ]karboksy-5- $^{18}\text{O}$ ]karboksybenzeno-1- $^{13}\text{C},^{18}\text{O}$ ]karboksylowy (PIN)  
(nie kwas benzeno-1,3,5- $^{13}\text{C}_2,1,5\text{-}^{18}\text{O}_2$ ]trikarboksylowy)kwas 2-karboksy[1- $^{14}\text{C}$ ]benzeno-1- $^{14}\text{C}$ ]karboksylowy (PIN)  
(nie kwas [1- $^{14}\text{C}$ ]benzeno-1,2-[1- $^{14}\text{C}$ ]dikarboksylowy)  
[1- $^{14}\text{C}$ ]kwas [1- $^{14}\text{C}$ ]ftalowyperoksyanhydryd [4- $^2\text{H}$ ]benzoesowy (PIN)  
peroksyd di([4- $^2\text{H}$ ]benzoilu)kwas [1- $^{14}\text{C}$ ]octowy (PIN; patrz P-82.2.4)L-[3- $^{14}\text{C},2,3\text{-}^2\text{H}_2,^{15}\text{N}$ ]seryna (patrz P-82.42)  
kwas (2S)-2-[ $^{15}\text{N}$ ]amino-3-hydroksy-[2,3- $^2\text{H}_2,3\text{-}^{14}\text{C}$ ]propanowy



1-(naftalen-2-ylo)-2-fenylo[2-<sup>15</sup>N]diazen (PIN)  
naftaleno-2-[N=<sup>15</sup>N]azobenzen (patrz p-82.6.3.2)



(naftalen-2-ylo)[<sup>18</sup>O]fosfonian *O*-etylu-<sup>18</sup>*O*-metylu (PIN)



1-oksyd 2-[(1-karboksyetylo)amino][1-<sup>15</sup>N]pirazyny  
<sup>15</sup>N-oksyd *N*-([1-<sup>15</sup>N]pirazyn-2-ylo)alaniny (patrz P-82.6.4)

### P-83.2 ZWIĄZKI SELEKTYWNIE ZNACZONE

Związekznaczony izotopowo jest uznawany jakoznaczony selektywnie wówczas, gdy mieszanina związków podstawionych izotopowo jest formalnie dodana do analogu niezmodyfikowanego w taki sposób, że pozycja(e), choć niekoniecznie numeracja, każdego znaczonego nuklidu jest zdefiniowana. Związek selektywnieznaczony może być uważany za mieszaninę związków specyficznieszaczonech. Selektywnieszaczoneym związkiem może być:

- (a) wielokrotnieznaczony, jeśli w niezmodyfikowanym związku jest więcej niż jeden

atom tego samego pierwiastka w pozycji gdzie następuje modyfikacja izotopowa, np. H, w CH<sub>4</sub>; lub gdzie jest wiele atomów tego samego pierwiastka w różnych pozycjach, w których następuje modyfikacja izotopowa, np. C, w C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O).

- (b)znaczony w sposób mieszany, o ile jest w nim więcej niż jedenznaczony nuklid, np. C i O w CH<sub>3</sub>-CH<sub>2</sub>-OH.

Kiedy w związku jest tylko jeden atom pierwiastka, który może być zmodyfikowany izotopowo, wówczas może to być jedynie znakowanie specyficzne.

**P-83.2.1** Wzory związków znaczone selektywnie

**P-83.2.1.1** Selektywnie znaczonego związku nie można opisać unikalnym wzorem strukturalnym; a więc przedstawia się go poprzez wstawienie symbolu(i) nuklidu(ów) poprzedzonym(ch) niezbędnym(i) lokantem(ami) (literami i/lub cyframi), lecz bez dolnych indeksów zwielokrotniających, zamkniętym w nawiasie kwadratowym, [ ], bezpośrednio przed zwykłym wzorem lub, jeśli jest to konieczne, przed częścią wzoru, która ma niezależną numerację. Nie powtarza się identycznych lokantów. Kiedy obecne są różne nuklidy, wówczas symbole nuklidów wpisuje się w porządku alfabetycznym wynikającym z ich symboli, lub jeśli symbole atomów są identyczne, wpisuje je w kolejności wzrastających mas atomowych.

Przykłady:

mieszanina związków podstawionych izotopowo	dodana do	związku izotopowo niemodyfikowanego	daje związki selektywnie znaczone
$\text{CH}_3\text{H}, \text{CH}_2^2\text{H}_2$ $\text{CH}^2\text{H}_3, \text{C}^2\text{H}_4$ lub każde dwa lub więcej z powyższych		$\text{CH}_4$	$[\text{}^2\text{H}]\text{CH}_4$
$\overset{4}{\text{C}}\text{H}_3-\overset{3}{\text{C}}\text{H}_2-\overset{2}{\text{C}}\text{H}_2-\overset{1}{\text{H}}-\text{COOH}$ $\overset{4}{\text{C}}\text{H}_3-\overset{3}{\text{C}}\text{H}_2-\overset{2}{\text{C}}\text{H}_2-\overset{1}{\text{C}}\text{OOH}$		$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{COOH}$	$[\text{}^2\text{-}^2\text{H}]\overset{4}{\text{C}}\text{H}_3-\overset{3}{\text{C}}\text{H}_2-\overset{2}{\text{C}}\text{H}_2-\overset{1}{\text{C}}\text{OOH}$
$\overset{4}{\text{C}}\text{H}_3-\overset{3}{^{14}\text{C}}\text{H}_2-\overset{2}{^{14}\text{C}}\text{H}_2-\overset{1}{\text{H}}-\text{COOH}$ $\overset{4}{\text{C}}\text{H}_3-\overset{3}{^{14}\text{C}}\text{H}_2-\overset{2}{\text{C}}\text{H}_2-\overset{1}{\text{H}}-\text{COOH}$ $\overset{4}{\text{C}}\text{H}_3-\overset{3}{\text{C}}\text{H}_2-\overset{2}{^{14}\text{C}}\text{H}_2-\overset{1}{\text{H}}-\text{COOH}$ lub dowolne dwa z powyższych		$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{COOH}$	$[\text{}^2,3\text{-}^{14}\text{C}]\overset{4}{\text{C}}\text{H}_3-\overset{3}{\text{C}}\text{H}_2-\overset{2}{\text{C}}\text{H}_2-\overset{1}{\text{H}}-\text{COOH}$
$\overset{2}{\text{C}}\text{H}_3-\overset{1}{^{14}\text{C}}\text{H}_2-\text{OH}$ $\overset{2}{\text{C}}\text{H}_3-\overset{1}{\text{C}}\text{H}_2-\overset{18}{\text{O}}\text{H}$ $\overset{2}{\text{C}}\text{H}_3-\overset{14}{\text{C}}\overset{1}{\text{C}}\text{H}_2-\overset{18}{\text{O}}\text{H}$ lub dowolne dwa z powyższych		$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{OH}$	$[\text{}^1\text{-}^{14}\text{C}, \text{}^{18}\text{O}]\overset{2}{\text{C}}\text{H}_3-\overset{1}{\text{C}}\text{H}_2-\text{OH}$

${}^{14}\overset{3}{\text{C}}\overset{2}{\text{H}}_2\overset{1}{\text{C}}\text{OO-CH}_3$ ${}^{14}\overset{3}{\text{C}}\overset{2}{\text{H}}_2\text{COO-}{}^{14}\overset{1}{\text{C}}\text{H}_3$ $\overset{3}{\text{C}}\overset{2}{\text{H}}_2\text{COO-}{}^{14}\overset{1}{\text{C}}\text{H}_3$ lub dowolne dwa z powyższych		$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-COO-CH}_3$	$[3\text{-}^{14}\text{C}]\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-COO-}[^{14}\text{C}]\text{CH}_3$
---	--	---	---

**P-83.2.1.2** W związkach selektywnie znaczone utworzonych poprzez zmieszanie kilku znanych związków podstawionych izotopowo z analogami izotopowo niemodyfikowanymi, liczba lub możliwa liczba znaczonego(ych) nuklidu(ów) w każdej pozycji może być wskazana indeksami dolnymi symboli atomów. Dwa lub więcej indeksów odnoszących się do tego samego nuklidu oddziela się średnikami. W związku wielokrotnie znaczone lub znaczone w sposób mieszany, indeksy dolne wpisuje się sukcesywnie w takiej samej kolejności, jak rozpatrywane są związki różnie izotopowo podstawione. Indeks dolny zero stosuje się po to, by wskazać, że jeden z związków podstawionych izotopowo nie jest zmodyfikowany we wskazanej pozycji.

Przykłady:

mieszanina związków podstawionych izotopowo	dodana do	związku izotopowo niemodyfikowanego	daje związki selektywnie znaczone
$\overset{2}{\text{C}}\overset{1}{\text{H}}_2\text{H-CH}_2\text{-OH}$ $\overset{2}{\text{C}}\overset{1}{\text{H}}_2\text{H}_2\text{-CH}_2\text{-OH}$		$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$	$[2\text{-H}_{1;2}]\overset{2}{\text{C}}\overset{1}{\text{H}}_2\text{-CH}_2\text{-OH}$
$\overset{2}{\text{C}}\overset{1}{\text{H}}_2\text{H}_2\text{-CH}_2\text{-OH}$ $\overset{2}{\text{C}}\overset{1}{\text{H}}_2\text{H}_2\text{-CH}_2\text{-}^{18}\text{OH}$		$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$	$[2\text{-H}_2;2,^{18}\text{O}_{0;1}]\overset{2}{\text{C}}\overset{1}{\text{H}}_2\text{-CH}_2\text{-OH}$

### P-83.2.2 Nazwy związków znaczone selektywnie

Nazwę związku znaczonego selektywnie tworzy się w ten sam sposób jak nazwę związku znaczonego specyficznie z tym, że zazwyczaj pomija się indeksy wielokrotniające po symbolach atomów. Nie powtarza się identycznych lokantów odpowiadających tym samym pierwiastkom. Nazwa związku selektywnie znaczonego różni się od nazwy odpowiedniego związku podstawionego izotopowo użyciem, zamiast okrągłego nawiasu, nawiasów kwadratowych [ ], obejmujących deskryptor nuklidu, oraz pominięciem powtórzeń identycznych lokantów i wielokrotniających indeksów dolnych.

Przykłady:

mieszanina związków podstawionych izotopowo	dodana do	jest nazywana
$\text{CH}_3^2\text{H}, \text{CH}_2^2\text{H}_2$ $\text{CH}^2\text{H}_3, \text{C}_2\text{H}_4$	$\text{CH}_4$	$[\text{}^2\text{H}]$ metan (PIN) (nie $[\text{}^2\text{H}_4]$ metan)
$\overset{2}{\text{C}}\text{H}_3-\overset{1}{\text{C}}\text{H}_2\text{H}-\text{OH}$ $\overset{2}{\text{C}}\text{H}_3-\overset{1}{\text{C}}^2\text{H}_2-\text{OH}$	$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{OH}$	$[\text{}^1\text{-}^2\text{H}]$ etan-1-ol (PIN) (nie $[\text{}^1,1\text{-}^2\text{H}_2]$ etan-1-ol)
$\overset{3}{^{14}}\text{C}\overset{2}{\text{H}}_3-\overset{1}{\text{C}}\text{H}_2-\text{COO}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ $\overset{3}{\text{C}}\text{H}_3-\overset{2}{\text{C}}\text{H}_2-\text{COO}-\overset{1}{^{14}}\text{C}\text{H}_2-\text{CH}_3$	$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{COO}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$	$[\text{}^3\text{-}^{14}\text{C}]$ propanian $[\text{}^1\text{-}^{14}\text{C}]$ etylu
$\overset{2}{\text{C}}\text{H}_2^2\text{H}-\overset{1}{\text{C}}\text{H}_2-\text{OH}$ $\overset{2}{\text{C}}\text{H}^2\text{H}_2-\overset{1}{\text{C}}\text{H}_2-\text{OH}$	$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{OH}$	$[\text{}^2\text{-}^2\text{H}_{1;2}]$ etanol (PIN)
$\overset{2}{\text{C}}\text{H}_2^2\text{H}-\overset{1}{\text{C}}\text{H}_2-\text{OH}$ $\overset{2}{\text{C}}\text{H}^2\text{H}_2-\overset{1}{\text{C}}\text{H}_2-\text{OH}$	$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{OH}$	$[\text{}^2\text{-}^2\text{H}_{2;2}]$ etan $[\text{}^{18}\text{O}_{0;1}]$ ol

**P-83.3 ZWIĄZKI NIESELEKTYWNE ZNACZONE**

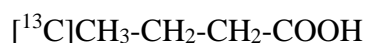
**P.83.3.1** Związek znaczone izotopowo jest uważany za znaczone nieselektywnie wówczas, gdy zarówno pozycja(e) jak i liczba znaczonych nuklidów nie są zdefiniowane.

Kiedy w tej samej pozycji znajdują się tylko atomy pierwiastka podlegającego modyfikacji w związku, wynikiem jest znakowanie specyficzne lub selektywne. Nieselektywne znakowanie wymaga by pierwiastek, który podlega modyfikacji, znajdował się w różnych pozycjach struktury. Przykładowo,  $\text{CH}_4$  i  $\text{CCl}_3-\text{CH}_2-\text{CCl}_3$  mogą być znakowane izotopem wodoru jedynie specyficznie lub selektywnie.

**P-83.3.2 Wzory**

Znakowanie nieselektywne jest pokazane we wzorze poprzez wstawienie symbolu nuklidu, w nawiasie kwadratowym, bezpośrednio przed wzorem liniowym bez lokantów i indeksów dolnych.

Przykład:



### P-83.3.3 Nazwy

Nazwę nieselektywnie znaczonego izotopowo związku tworzy się w ten sam sposób, jak nazwę związku znaczonego selektywnie, lecz nie zawiera ona ani lokantów ani indeksów dolnych w deskrypcji nuklidu.

Przykłady:

chloro[<sup>2</sup>H]benzen (PIN)  
[<sup>13</sup>C]propan-1,2,3-triol (PIN)  
[<sup>13</sup>C]glicerol

### P-83.4 ZWIĄZKI IZOTOPOWO DEFICYTOWE

**P-83.4.1** Związek znaczonego izotopowo może być określony jako izotopowo deficytowy wówczas, gdy zawartość izotopu jednego lub więcej pierwiastków jest zubożona, np. gdy jednego lub więcej nuklidów jest mniej niż w składzie naturalnym.

#### P-83.4.2 Wzory

Deficyt izotopu jest wskazywany we wzorze poprzez dodanie kursywą symbolu ‘def’, bez łącznika, bezpośrednio przed symbolem odpowiedniego nuklidu.

Przykład:



#### P-83.4.3 Nazwy

Nazwę związku izotopowo deficytowego tworzy się poprzez dodanie kursywą symbolu ‘def’, bez łącznika, bezpośrednio poprzedzającego symbol odpowiedniego nuklidu; oba zamknięte są w nawiasie kwadratowym i wymieniane przed nazwą lub fragmentem nazwy, która jest izotopowo modyfikowana.

Przykład:

trichloro[*def*<sup>13</sup>C]metan (PIN)  
[*def*<sup>13</sup>C]chloroform

### P-83.5 ZNAKOWANIE OGÓLNE I RÓWNOMIERNE

**P-83.5.1** W nazwie związku selektywnie znaczonego, w którym wszystkie pozycje wskazanego pierwiastka są znaczone, choć niekoniecznie w tej samej proporcji, w miejsce lokantów stosuje się symbol ‘G’, aby wskazać znakowanie ‘ogólne’.



Przykłady:

Związki podstawione izotopowo	dodane do	określamy jako
1. mieszanina podstawionych związków (znakowanie selektywne)		
$\left. \begin{array}{l} \text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-}^{14}\text{COOH} \\ \text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-}^{14}\text{CH}_2\text{-COOH} \\ \text{CH}_3\text{-}^{14}\text{CH}_2\text{-CH}_2\text{-COOH} \\ \text{}^{14}\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-}^{14}\text{COOH} \\ \text{etc.} \end{array} \right\}$	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-COOH}$	kwask[G- $^{14}\text{C}$ ]butanowy
2. D-Glukozę, w której wszystkie sześć pozycji jest znakowanych $^{13}\text{C}$ , lecz niekoniecznie równomiernie, jest określana jako		D-[G- $^{14}\text{C}$ ]glukoza

**P-83.5.2** W nazwie związku selektywnie znaczonego, w którym wszystkie pozycje wskazanego pierwiastka są znakowane w tych samych proporcjach izotopów, stosuje się symbol „U” zamiast lokantów, aby wskazać ‘równomierne’ znakowanie.

Przykłady:

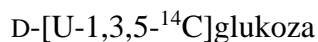
Związki podstawione izotopowo	dodane do	określamy jako
1. Mieszanina związków podstawionych (znakowanych równomiernie)		
$\begin{array}{l} \text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-}^{14}\text{COOH} \\ \text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-}^{14}\text{CH}_2\text{-COOH} \\ \text{CH}_3\text{-}^{14}\text{CH}_2\text{-CH}_2\text{-COOH} \\ \text{}^{14}\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-COOH} \\ \text{w równych ilościach} \end{array}$	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-COOH}$	kwask [U- $^{14}\text{C}$ ]butanowy
2. D-Glukozę, w której nuklid $^{14}\text{C}$ jest równomiernie rozprowadzony w sześciu pozycjach jest określana jako		D-[U- $^{14}\text{C}$ ]glukoza

**Uwaga:** W przypadku nuklidów radioaktywnych, wyrażenie ‘takie same proporcje’ znaczy też ‘taka sama radioaktywność’.

**P-83.5.3** W nazwie związku selektywnie znaczonego, symbol ‘U’ (patrz P-83.5.2) umieszczony przed odpowiednimi lokantami stosuje się podobnie, by wskazać znakowanie w tych samych proporcjach w określonych pozycjach.

Przykład:

D-glukoza, w której nuklid  $^{14}\text{C}$  jest równomiernie rozprowadzony pomiędzy pozycje 1,3 i 5 jest określana jako



**P-84 PORÓWNAWCZE PRZYKŁADY WZORÓW I NAZW ZWIĄZKÓW  
MODYFIKOWANYCH IZOTOPOWO**

Rodzaje związków	Wzory	Nazwy
niezmodyfikowany	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$	etanol
podstawiony izotopowo	$\overset{2}{\text{C}}^2\text{H}_3\text{-}\overset{1}{\text{C}}\text{H}_2\text{-O}^2\text{H}$	(2,2,2- $^2\text{H}_3$ )etan-1-( $^2\text{H}$ )ol (PIN) (O,2,2,2- $^2\text{H}_4$ )-etan-1-ol
znaczony specyficznie	$\overset{2}{\text{C}}[{}^2\text{H}_3]\text{-}\overset{1}{\text{C}}\text{H}_2\text{-O}[^2\text{H}]$	[2,2,2- $^2\text{H}_3$ ]etan-1-[ $^2\text{H}$ ]ol (PIN) [O,2,2,2- $^2\text{H}_4$ ]-etan-1-ol
znaczony selektywnie	$[\text{O},2\text{-}^2\text{H}]\overset{2}{\text{C}}\overset{1}{\text{H}}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$ $[\text{O},2\text{-}^2\text{H}_2,2,{}^{18}\text{O}_{0,1}]\overset{2}{\text{C}}\overset{1}{\text{H}}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$	[2- $^2\text{H}$ ]etan-1-[ $^2\text{H}$ ]ol [2- $^2\text{H}_{2,2}$ ]etan-1-[ $^{18}\text{O}_{0,1}$ ]ol (PIN)
znaczony nieselektywnie	$[{}^2\text{H}]\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$	[2H]etan-1-ol
izotopowo deficytowy	$[\text{def}^{13}\text{C}]\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$	[ $\text{def}^{13}\text{C}$ ]etanol