

Nazewnictwo związków chemicznych przyjęte w systemie iChem

Andrzej M. Grossman, Politechnika Śląska, Gliwice

The logo for iChem, featuring the text "iChem" in a stylized, italicized font with a glowing effect, set against a dark rectangular background.

Szkolenie magazynierów, Gliwice 8.06.2000

Podstawą klasyfikacji odczynnika w systemie iChem jest nr CAS (Chemical Abstracts Service Registry Number)

Źródło nomenklatury:

W większości przypadków katalogi firmy Merck:

ChemDat wersja angielska (1999)

ChemCat1 wersja polska (1998)

Do każdego numeru CAS przypisana jest najczęściej jedna nazwa polska i przynajmniej jedna nazwa angielska. (Przeważnie jest kilka synonimów).

Nomenklatura - zwłaszcza polska nomenklatura związków nieorganicznych, nie jest jednorodna, w większości „stara”
Planujemy dopisanie nowej jako synonimów.

Związki organiczne - raczej nazwy popularne, przyjęte w handlu.
Nazewnictwo zgodne z nomenklaturą genewską lub przyjętą w CA
występuje sporadycznie dodatkowo.

Związki nieorganiczne:

nazwy polskie **anion** **kation**

np. Chlorek sodowy ale Metaboran sodu

Siarczan żelaza(II) (ale też żelazawy)

Siarczan amonu i żelaza(II) ale Szczawian amonowo-żelazowy

nazwy angielskie **kation** **anion**

np. Sodium chloride, Copper(II) sulfate

Ammonium iron(II) sulfate

Hydraty:

monohydrat, hemihydrat ($0,5\text{H}_2\text{O}$), sesquihydrat (lub 1,5 hydrat),

pentahydrat ($5\text{H}_2\text{O}$), dodecahydrat ($10\text{H}_2\text{O}$),

10043-01-3	Siarczan glinowy
57292-32-7	Siarczan glinowy, <i>monohydrat</i> $*\text{H}_2\text{O}$
17927-65-0	Siarczan glinowy, hydrat $*x\text{H}_2\text{O}$ (czasem n-hydrat)
7784-31-8	Siarczan glinowy, 18-hydrat $*18\text{H}_2\text{O}$

Hydraty c.d.:

Firmy często stosują nr CAS związku bezwodnego, a w nazwie podają ilość cząsteczek wody hydratacyjnej jeżeli nie znalazły dla takiego związku nr CAS (takie przypadki mogą wystąpić w bazie iChem aczkolwiek staraliśmy się je wyeliminować)

Jeżeli związku o potrzebnej liczbie cząsteczek wody nie ma w bazie iChem proponujemy:

- a) sprawdzić w wyszukiwarkach internetowych i katalogach odczynników czy takiego związku rzeczywiście nie ma - jeżeli jest dopisać do bazy iChem,
- b) nie znaleziono - skorzystać ze związku bezwodnego - ilość cząsteczek wody wpisać w polu „opis”
- c) nie ma związku bezwodnego - skorzystać ze związku o nieokreślonej (xH_2O) ilości wody- ilość cząsteczek wody wpisać w polu „opis”
- d) nie ma związku o nieokreślonej ilości wody - skorzystać ze związku o najniższej ilości cząsteczek wody - ilość cząsteczek wody wpisać w polu „opis”

Przedrostki w nazwach polskich:

raczej di-, tetra- i.t.d. np. tetrachlorek węgla (nie czterochlorek)

Zapis wzorów chemicznych

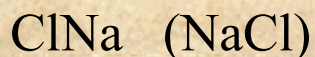
Sumaryczny, w ogólnie przyjętej kolejności: **C**, **H** i **dalej alfabetycznie pozostałe pierwiastki**.

Hydraty - dodatkowo po * ilość cząsteczek wody.

Chlorowodorek, siarczan w związkach organicznych - w większości przypadków po * (*HCl, *H₂SO₄)

- czasem zsumowane we wzorze. Nie stosowano spacji.

przykłady:



w sporadycznych przypadkach występuje jeszcze - SO₄ (CuSO₄) co postaramy się poprawić.

Inne uwagi:

Wzorce roztworowe metali i niemetali do AAS, ICP-OES i.t.p. wpisywać pod numerem CAS pierwiastka, w polu zastosowanie wybrać „wzorzec”, w polu „opis” podać stężenie i ewentualnie do jakiej techniki jest przeznaczony.

Węgiel drzewny aktywowany - ma nr CAS węgla (C)

Kwarc - ma nr CAS ditlenku krzemu (SiO_2)

Literą D na końcu nazwy oznaczono związki deuterowane (np. Aceton-D6)

Zagrożenia (Risk R), środki bezpieczeństwa (Safety S)

W katalogach w.w. oznaczenia są stosowane pojedynczo i w postaci kombinacji symboli np.:

R 20 - działa szkodliwie w przypadku narażenia drogą oddechową

R 21 - działa szkodliwie w przypadku kontaktu ze skórą

R 22 - działa szkodliwie w przypadku spożycia

R 20/21/22 - Szkodliwy przy wdychaniu, po spożyciu i w kontakcie ze skórą.

Podobnie dla środków bezpieczeństwa (S)

Jak widać znaczeniowo oba sposoby pokrywają się.

W bazie iChem, zastosowano system uproszczony, uwzględniający tylko pojedyncze oznaczenia. Oznaczenia kombinowane są rozbite na odpowiadające im oznaczenia pojedyncze.

Klasyfikacja przy wpisie na stan magazynu

Formularz „Wpis nowego stanu”

Czystość:

Ze względu na coraz częstsze klasyfikowanie czystości odczynnika ze względu na jego zastosowanie przeznaczono do wpisu 2 pola:

„Czystość” - rozumiana tradycyjnie (do wyboru z listy)

CRM (certyfikowany materiał referencyjny) , ch.cz.,cz., cz.d.a., extra pure, farm., ocz., pract., pure, puriss., purum, sp.cz., spektr.cz., techn., wzorzec, inne

„Zastosowanie” - jako dodatkowe określenie (do wyboru z listy)

barwnik mikroskopowy, do analizy, do analizy śladowej, do biochemii - mikrobiologii, do chromatografii (GC,LC,HPLC,TLC), do mikroelektroniki lub TVC, do spektroskopii (IR,UV,VIS), do syntezy, wskaźnik, odważka analityczna, inne.

Jeżeli żadna z konkretnych kombinacji nie odpowiada należy wybrać „inne” a dodatkowe objaśnienia wpisać w polu „opis”.

Pole „opis”

można wpisywać:

- stężenie roztworu,
- postać - np. dla metali laski, granulki, drut i.t.p.,
- wygląd - np. mętny, zwietrzały i.t.p.,
- liczbę cząsteczek wody jeżeli nie jest zgodna z nazwą (patrz pod hydraty),
- wszystkie inne uwagi charakteryzujące właściwości chemiczne bądź fizyczne odczynnika,
- nazwę odczynnika z etykiety jeżeli istnieje obawa, że będą trudności ze znalezieniem odczynnika pod nazwami użytymi w bazie.

Nie używać tego pola do zapisu np. oznaczeń kodowych, pochodzenia i.t.p. Do tego celu służy szereg dodatkowych pól w formularzu.

Zasady dodawania nowego odczynnika do bazy

- Znaleźć w katalogach firm odczynnikowych lub wyszukiwarek internetowych: nr **CAS**, właściwą (niestety przeważnie angielską) nazwę odczynnika i ewentualnie wzór sumaryczny.
(Dla roztworów stosować **CAS substancji rozpuszczonej!**)
- Wpisać w odpowiednie pola uzyskane dane.

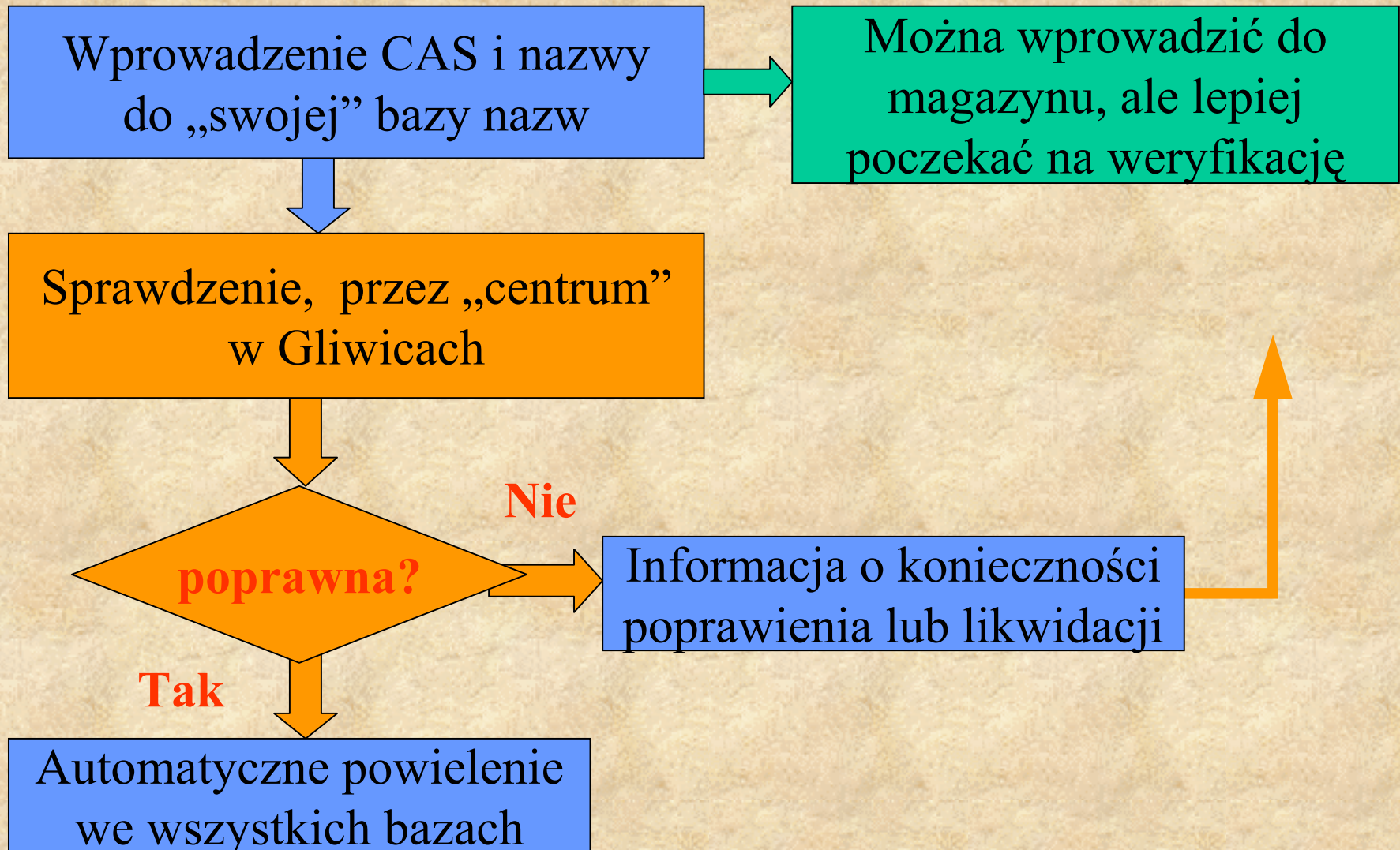
Wprowadzone nazwy podlegają kontroli w „centrali”

•Substancje które nie mają numeru CAS

Wpisać pod własnym numerem kodowym zaczynającym się od trójliterowego kodu oznaczającego uczelnię np. PSL-123.

Wprowadzone nazwy podlegają sporadycznej kontroli w „centrali”, głównie ze względu na celowość wykorzystania takich wpisów w sieci ogólnopolskiej.

Oznaczenia w polu „CAS” zaczynające się od cyfry są traktowane jako prawidłowy nr CAS i podlegają kontroli



Błędne numery CAS w katalogach firmy MERCK

CAS ma być	CAS jest	nazwa
34592-47-7	34292-47-7	(-)-Kwas (R)-tiazolidyno-4-karboksylowy
50856-26-3	50856-06-2	Glikol polietylenowy, eter diwinylowy 200
615-41-8	515-41-8	2-Chloro-1-jodobenzen
7647-17-8	7646-17-8	Chlorek cezu
9001-70-9	9001-71-9	Kazeina
9005-65-6	9005-65-5	Polysorbat 80 (Tween 80)

Użyteczne internetowe wyszukiwarki nazw i nr CAS związków chemicznych

<http://www.chemfinder.com>

<http://webbook.nist.gov/chemistry/>

<http://www.buyersguidechem.de/bgcas.htm>