



ΕΘΝΙΚΟ & ΚΑΠΟΔΙΣΤΡΙΑΚΟ  
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΘΗΝΩΝ  
NATIONAL AND KAPODISTRIAN  
UNIVERSITY OF ATHENS



# Ονοματολογία στην Οργανική Χημεία

**Αθανάσιος Γκιμήσης**

Αναπληρωτής Καθηγητής

Τμήμα Χημείας

Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών

1<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο Ονοματολογίας και Ορολογίας της Χημείας, ΕΕΧ, 22 Φεβρουαρίου 2014

# ΟΝΟΜΑΤΟΛΟΓΙΑ ΟΡΓΑΝΙΚΩΝ ΕΝΩΣΕΩΝ:

# VIAGRA – SILDENAFIL

ή

5-(2-αιθοξυ-5-((4-μεθυλοπιπεραζιν-1-υλο)σουλφονυλο)-1-μεθυλο-3-προπυλο-1H-πυραζολο[4,3-d]πυριμιδιν-7(6H)-όνη

The screenshot displays the MarvinSketch 5.11.4 interface. The central workspace shows the chemical structure of Sildenafil. To the right, two 'Naming' dialog boxes are open. The top one shows the 'Preferred IUPAC Name' as '5-(2-ethoxy-5-[(4-methylpiperazin-1-yl)sulfonyl]phenyl)-1-methyl-3-propyl-1H,6H,7H-pyrazolo[4,3-d]pyrimidin-7-one'. The bottom one shows the 'Traditional Name' as 'sildenafil'. A 'Naming Options' dialog box is also open, showing 'Traditional Name' selected under 'Generate' and 'Single fragment mode' checked.

MarvinSketch 5.11.4

File Edit View Insert Atom Bond Structure Calculations Tools Help

100%

**Naming**

Preferred IUPAC Name =  
5-(2-ethoxy-5-[(4-methylpiperazin-1-yl)sulfonyl]phenyl)-1-methyl-3-propyl-1H,6H,7H-pyrazolo[4,3-d]pyrimidin-7-one

**Naming Options**

Generate

Preferred IUPAC Name

Traditional Name

Single fragment mode

OK Cancel Restore Defaults

**Naming**

Traditional Name = sildenafil

2D

# Διεθνή Συστήματα Ονοματολογίας Χημικών Ενώσεων

- IUPAC (International Union of Pure & Applied Chemistry) - <http://www.iupac.org/>
- CAS-ACS (Chemical Abstracts Service – American Chemical Society) - <https://www.cas.org/>
- IUBMB (International Union of Biochemistry & Molecular Biology) - <http://www.iubmb.org/>
- World Health Organization (non-proprietary names for drugs) <http://www.who.int/medicines/services/inn/en/>
- ISO - International Organization for Standardization (e.g., pesticides) - <http://www.iso.org/iso/home.html>
- INCI - International Nomenclature of Cosmetic Ingredients - <http://www.personalcarecouncil.org/>

<https://www.cas.org/content/chemical-substances>

ACS | Journals | C&EN | CAS | Languages ▼

Site Search

Log In To: SciFinder

Products Content Training Contact Us News About CAS

**Content**

- ▶ Chemical Substances
- References
- Reactions
- Chemical Suppliers
- Regulated Chemicals

Chemical Industry Notes  
Markush  
At a Glance

Home > Content > Chemical Substances

## CAS REGISTRY - The gold standard for chemical substance information

CAS REGISTRY<sup>SM</sup> contains more than 82 million unique organic and inorganic chemical substances, such as alloys, coordination compounds, minerals, mixtures, polymers and salts, and more than 65 million sequences—more than any other database of its kind.






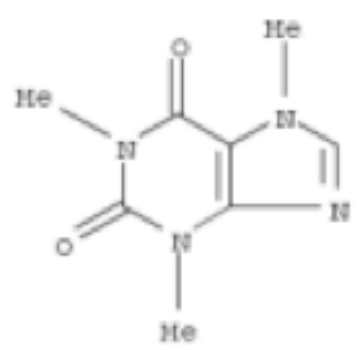
When you need to positively identify a chemical substance, you can rely on the authoritative source for chemical names and structures of CAS REGISTRY. You can also identify your substance of interest by its [CAS Registry Number<sup>®</sup>](#), which is universally used to provide a unique, unmistakable identifier for chemical substances.

### CAS Content

- [Chemical Substances - CAS REGISTRY](#)
- [References - CPlus](#)
- [Reactions - CASREACT](#)
- [Chemical Suppliers - CHEMCATS](#)
- [Regulated Chemicals - CHEMLIST](#)
- [Chemical Industry Notes - CIN](#)

# Παράδειγμα χημικής ένωσης στη βάση δεδομένων SciFinder

## Sample record from SciFinder®

<b>SUBSTANCE DETAIL</b> ⓘ	 <b>Get References</b>	 <b>Get Reactions</b>	 <b>Get Commercial Sources</b>	 <b>Get Regulatory Information</b>	 <b>Send to SciPlanner</b>
<a href="#">Return</a>					
<b>CAS Registry Number:</b> 58-08-2					
C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>					
1H-Purine-2,6-dione, 3,7-dihydro-1,3,7-trimethyl-					
Caffeine (8CI); 1,3,7-Trimethyl-2,6-dioxopurine; 1,3,7-Trimethylxanthine; 3,7-Dihydro-1,3,7-trimethyl-1H-purine-2,6-dione; 7-Methyltheophylline; Alert-Pep; Asia migrine; Cafalgine; Cafeina; Caffedrine; Caffein; Cafipel; DHCplus; Dasin; Diurex; Durvitan; Guanine; Hycomine; Koffein; Mateina; Methyltheobromine; Midron extra; Miudol; NSC 5036; New Cetamol; No-Doz; Palergot-C; Phensal; Propoxyphene Compound 65; Refresh'n; SK 65 Compound; Shape Plus; Stay Alert; Stim; Synalgos; Thein; Theine; Tri-Aqua; Wigraine					
<b>Deleted CAS Registry Numbers:</b> 71701-02-5, 95789-13-2					
<b>Source of Registration:</b> CA					
<b>~30,466 References</b>					
					

# http://www.iupac.org/



## IUPAC

International Union of Pure and Applied Chemistry

### Highlights

- [The IUPAC Network](#)
- [Periodic Table of the Elements](#)
- [Color Books](#)

[Login](#) | [Contact](#) | [Forum](#)



[About](#) [Projects](#) [Publications](#) [Conferences](#)

## Welcome to the International Union of Pure and Applied Chemistry

The International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) serves to advance the worldwide aspects of the chemical sciences and to contribute to the application of chemistry in the service of Humankind. As a scientific, international, non-governmental and objective body, IUPAC can address many global issues involving the chemical sciences.

### Reminders & Deadlines:

- [Thieme-IUPAC Prize - 2014 Call for Nominations](#)
  - Deadline: 13 December 2013
- [2014 IUPAC-Richter Prize - Call for Nominations](#)
  - Deadline: 31 December 2013
- [2014 IUPAC-ThalesNano Prize in Flow Chemistry](#)
  - Deadline: 31 January 2014
- [2014 IUPAC-SOLVAY International Award for Young Chemists announced](#)
  - Deadline: 1 February 2014
- [DSM Materials Sciences Award 2014 - Call for Nominations](#)
  - Deadline: 7 February 2014
- [PhosAgro/UNESCO/IUPAC research grants in green chemistry – call for applications](#)
  - Deadline: 28 February 2014

### News

[PhosAgro/UNESCO/IUPAC research grants in green chemistry – call for applications](#)  
20 Nov 2013

[2014 IUPAC-SOLVAY International Award for Young Chemists announced](#)  
30 Oct 2013

[Heartfelt Congratulations to OPCW](#)  
16 Oct 2013

[DSM Materials Sciences Award 2014 - Call for Nominations](#)  
16 Oct 2013

### Upcoming Events

[Chemistry Conference for Young Scientists 2014](#)  
February 27 - February 28

[15th Florida Heterocyclic and Synthetic Conference \(FloHet-2014\)](#)  
March 02 - March 05

# Διεθνής Ένωση Καθαρής & Εφαρμοσμένης Χημείας

- Ιδρύθηκε το 1919 – αντικατέστησε το IACS (International Association of Chemical Societies) -
- Έχει έδρα στη Ζυρίχη και Γραμματεία στην North Carolina, USA. (Executive Director J.D. Peterson).
- Λειτουργεί με τη βοήθεια 1400 εθελοντών επιστημόνων
- Εκδίδει τα λεγόμενα «έγχρωμα» βιβλία:
  - **Gold Book:** Χημική Ορολογία
  - **Green book:** Μονάδες και Σύμβολα στη Φυσικοχημεία
  - **Red Book:** Ονοματολογία στην Ανόργανη Χημεία
  - **Orange Book:** Ορολογία στην Αναλυτική Χημεία
  - **White Book:** Ονοματολογία στην Βιοχημεία
  - **Purple Book:** Μακρομοριακή Ονοματολογία
  - **Blue Book:** Ονοματολογία στην Οργανική Χημεία



Chemistry International



Pure and Applied Chemistry



Macromolecular Symposia



Chemical Education International



DIDAC



Polymer Education Website



Global Network for information and Properties on Agrochemicals



International Union of Pure and Applied Chemistry

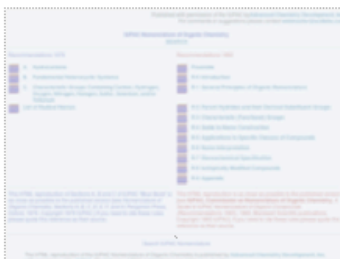
THE NETWORK



Evaluated Kinetic Data



Compendium of Chemical Terminology



Nomenclature of Organic Chemistry



Compendium of Analytical Nomenclature



Biochemical Nomenclature and Related Documents



ThermoML



Recommendations on Organic & Biochemical Nomenclature, Symbols & Terminology



Green Chemistry Directory



Solubility Database, Version 1.0



Stability Constants Database







# Το μπλε βιβλίο για την ονοματολογία στην Οργανική Χημεία

Published with permission of the IUPAC by [Advanced Chemistry Development, Inc.](http://www.acdlabs.com)  
For comments or suggestions please contact [webmaster@acdlabs.com](mailto:webmaster@acdlabs.com)












## IUPAC Nomenclature of Organic Chemistry

[SEARCH](#)

### Recommendations 1979

-  [A. Hydrocarbons](#)
-  [B. Fundamental Heterocyclic Systems](#)
-  [C. Characteristic Groups Containing Carbon, Hydrogen, Oxygen, Nitrogen, Halogen, Sulfur, Selenium, and/or Tellurium](#)
-  [List of Radical Names](#)

### Recommendations 1993

-  [Preamble](#)
-  [R-0 Introduction](#)
-  [R-1 General Principles of Organic Nomenclature](#)
-  [R-2 Parent Hydrides and their Derived Substituent Groups](#)
-  [R-3 Characteristic \(Functional\) Groups](#)
-  [R-4 Guide to Name Construction](#)
-  [R-5 Applications to Specific Classes of Compounds](#)
-  [R-6 Name Interpretation](#)
-  [R-7 Stereochemical Specification](#)
-  [R-8 Isotopically Modified Compounds](#)
-  [R-9 Appendix](#)

This HTML reproduction of Sections A, B and C of IUPAC "Blue Book" is as close as possible to the published version [see *Nomenclature of Organic Chemistry, Sections A, B, C, D, E, F, and H*, Pergamon Press, Oxford, 1979. Copyright 1979 IUPAC.] If you need to cite these rules please quote this reference as their source.

This HTML reproduction is as close as possible to the published version [see **IUPAC, Commission on Nomenclature of Organic Chemistry. A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (Recommendations 1993)**, 1993, Blackwell Scientific publications, Copyright 1993 IUPAC]. If you need to cite these rules please quote this reference as their source.

### Search IUPAC Nomenclature

The HTML reproduction of the IUPAC Nomenclature of Organic Chemistry is published by [Advanced Chemistry Development, Inc.](http://www.acdlabs.com) with permission of the [IUPAC](#). The following IUPAC publications were taken as a source:

- Nomenclature of Organic Chemistry, Sections A, B, C, D, E, F, and H, Pergamon Press, Oxford, 1979. Copyright 1979 IUPAC.
- A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (Recommendations 1993), 1993, Blackwell Scientific publications, Copyright 1993 IUPAC.

If you need to cite these rules please quote the references above as their source.

[SEARCH](#)

# Το μπλε βιβλίο για την ονοματολογία στην Οργανική Χημεία

- Η ηλεκτρονική έκδοση

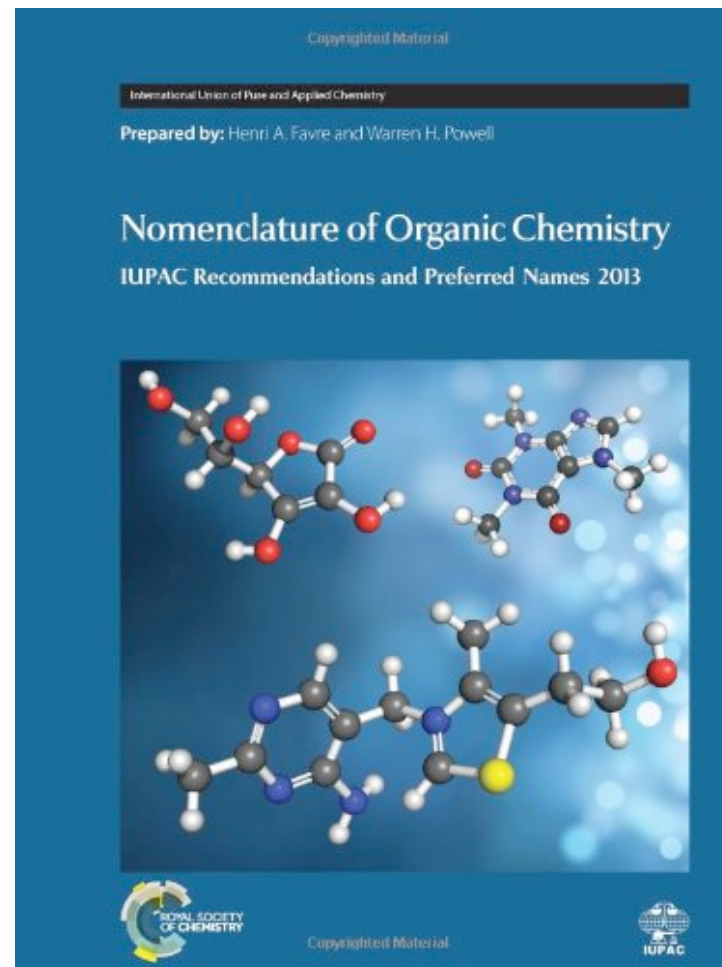
<http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/>

βασίζεται σε δύο παλαιότερες εκδόσεις της IUPAC (1979 & 1993):

1. *Nomenclature of Organic Chemistry, Sections A, B, C, D, E, F, and H*, Pergamon Press, Oxford (1979).
2. *A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (Recommendations 1993)*, Blackwell Scientific publications (1993).

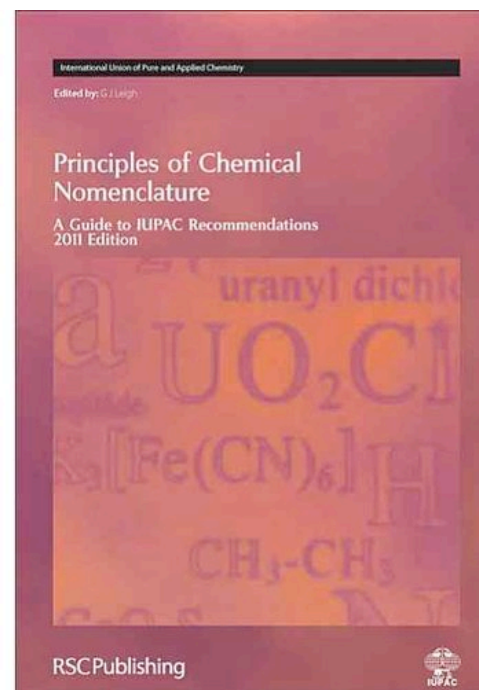
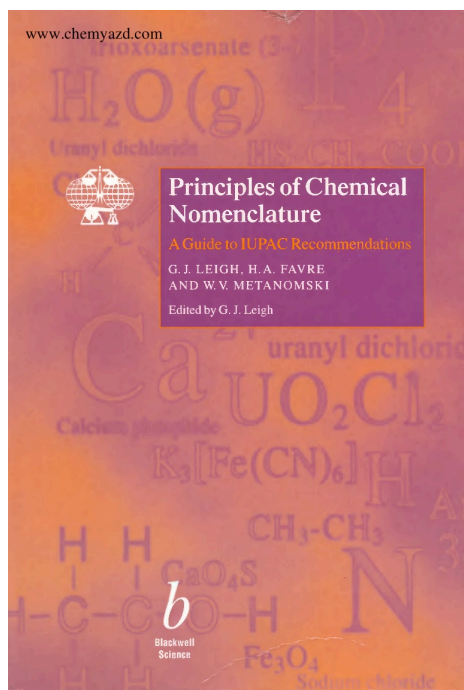
- Πρόσφατα (2013) κυκλοφόρησε η νέα έκδοση:

1. *Nomenclature of Organic Chemistry: IUPAC Recommendations and Preferred Names 2013* (prepared for publication by H. A. Favre & W. H. Powell), RSC (2013).



Υπάρχουν μεταφράσεις στα Ολλανδικά, Τσέχικα, Πορτογαλικά, Κροατικά, Καταλανικά ...αλλά όχι στα Ελληνικά...

## Χρήσιμα βιβλία από την IUPAC για φοιτητές/καθηγητές



1. *Principles of Chemical Nomenclature. A Guide to IUPAC Recommendations* by G. J. Leigh, H.A. Favre, W.V. Metanovski, Blackwell Science (1998).

Διαθέσιμο ελεύθερα από τη IUPAC:

<http://old.iupac.org/publications/books/author/leigh98.html>

- Πρόσφατα (2011) κυκλοφόρησε η νέα έκδοση:
  1. *Principles of Chemical Nomenclature. A Guide to IUPAC Recommendations* by G. J. Leigh (Ed.), RSC (2011).

# Από το Queen Mary UoLondon (G.P.Moss): <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/>



## INTERNATIONAL UNION OF PURE AND APPLIED CHEMISTRY

Recommendations on Organic & Biochemical Nomenclature, Symbols & Terminology etc.

<http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/>

World Wide Web material prepared by G. P. Moss

[School of Biological and Chemical Sciences, Queen Mary University of London,](#)

Mile End Road, London, E1 4NS, UK

[g.p.moss@qmul.ac.uk](mailto:g.p.moss@qmul.ac.uk)

To search the database [click here](#).

If the table below is unusable  
check this button  
for an alternative presentation

[What's Here and What's New](#)

[Changes to Published Documents for World Wide Web Presentation](#)

[Main IUPAC Home Page](#)

Full text of IUPAC Recommendations

[Glossary of Organic Class Names](#)

[Glossary of Terms in Physical Organic Chemistry](#)

[Basic Terminology of Stereochemistry](#)

[Hantzsch-Widman Nomenclature for Heteromonocyclic Rings](#)

[Non-standard Valence States \(Lambda Convention\)](#)

[Cyclic compounds with contiguous formal double bonds \(delta Convention\)](#)

[Fused Ring Nomenclature](#)

[Phane Nomenclature](#)

[Phane Nomenclature Part II](#)

[Glossary of Terms in Bioinorganic Chemistry](#)

[Glossary of Medicinal Chemistry Terms](#)

[Nomenclature of Isotopically Modified Compounds \(Section H\)](#)

[IUPAC Atomic Weights and Periodic Table \(2013 values\) \*\*New values\*\*](#)

[Von Baeyer nomenclature](#)

[Spiro nomenclature](#)

[Natural product nomenclature \(Section F\)](#)

[Radicals, Ions & Radical Ion Nomenclature](#)

[Gold Book IUPAC definitions of terms.](#)

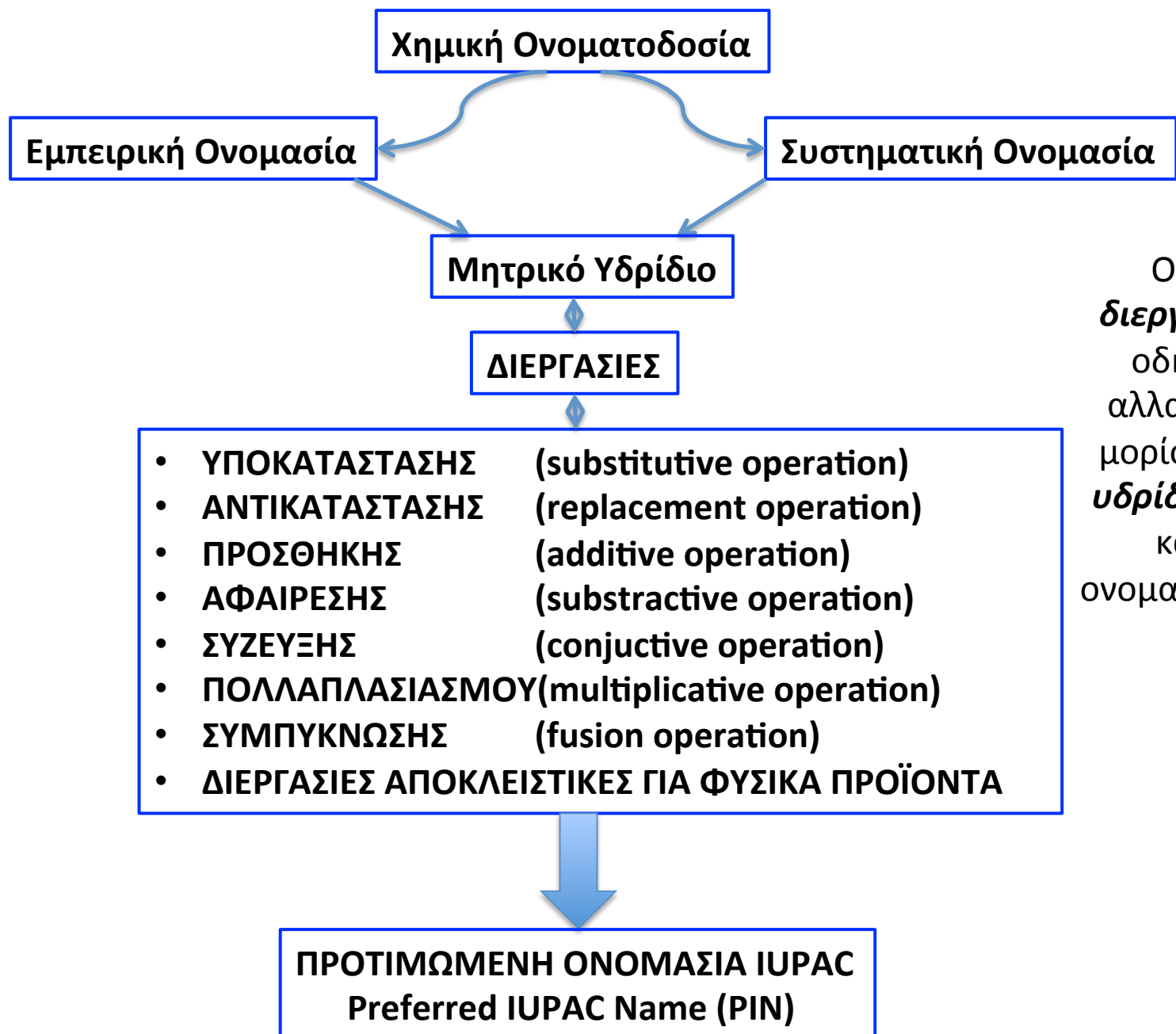
[Fullerene nomenclature](#)

[Numbering of Fullerenes](#)

[Numerical Terms to 9999](#)

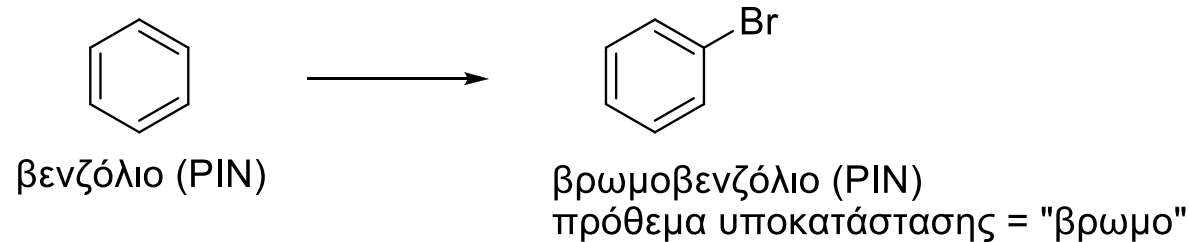
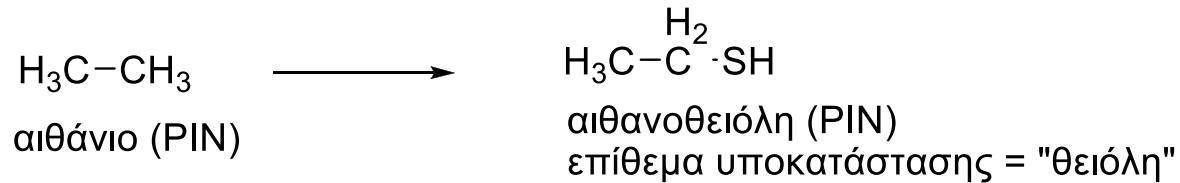
[Regular single-strand organic polymers nomenclature](#)

Watch this space.



Οι συγκεκριμένες **διεργασίες (operations)** οδηγούν σε δομικές αλλαγές ενός μητρικού μορίου, που ονομάζεται **υδρίδιο (parent hydride)** και του οποίου η ονομασία χρησιμοποιείται ως βάση.

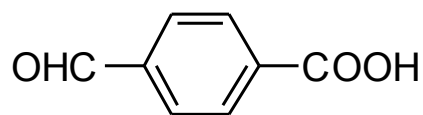
## Διεργασίες Υποκατάστασης



Η ονοματοδοσία προχωρά με υποκατάσταση ενός υδρογόνου στο μητρικό υδρίδιο με ένα άλλο άτομο/ομάδα.

Οι διεργασίες υποκατάστασης είναι το πλέον χρησιμοποιούμενο σύστημα ονοματοδοσίας. Με μικρότερη συχνότητα χρησιμοποιούνται και άλλες τεχνικές ονοματολογίας, όπως η ονοματολογία ομολογής σειράς ως δυαδικό σύστημα (π.χ., αλκοόλη, οξύ, αιθέρας).

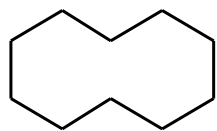
## Διεργασίες Αντικατάστασης



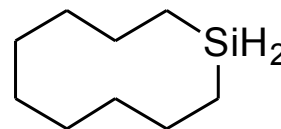
4-φορμυλοβενζοϊκό οξύ (PIN)



4-(σεληνιοφορμυλο)βενζοϊκό οξύ  
πρόθεμα αντικατάστασης = "σελήνιο"  
(ή "σεληνο" για το αγγλικό "seleno")



κυκλοδεκάνιο (PIN)

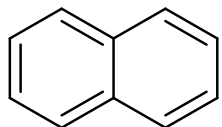


σίλακυκλοδεκάνιο (PIN)  
πρόθεμα αντικατάστασης = "σιλα"  
(ή "πυριπο" για το αγγλικό "sila")

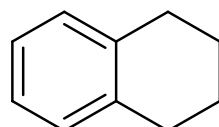
Η ονοματολογία σκελετικής αντικατάστασης, γνωστή και ως **Αντικατάσταση 'α'**, αντικαθιστά ένα άτομο ή μια ομάδα του σκελετού αντί για ένα υδρογόνο στο μητρικό μόριο (π.χ., με όρους όπως 'οξα' ή 'αζα').

Αυξάνει δραματικά τις δυνατότητες του συστήματος ονοματολογίας, αφού με μια μικρή βάση μητρικών υδριδίων, δίνεται η δυνατότητα ονοματοδοσίας μεγάλου αριθμού ενώσεων. Σε ένα ακραίο παράδειγμα, η πυριδίνη γίνεται «αζαβενζόλιο».

### Διεργασίες Προσθήκης

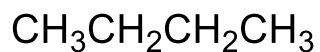


ναφθαλένιο (PIN)

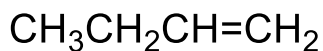


1,2,3,4-τετραϋδ로나φθαλένιο (PIN)  
πρόθεμα προσθήκης 'H' = "υδρο"

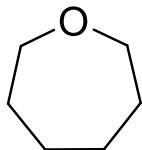
### Διεργασίες Αφαίρεσης



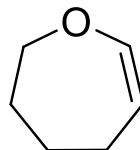
βουτάνιο (PIN)



βουτ-1-ένιο (PIN)  
κατάληξη αφαίρεσης 'H' = ένιο



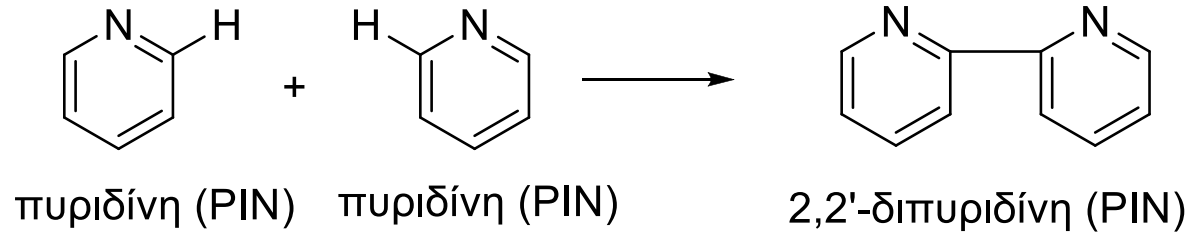
οξεπάνιο (PIN)



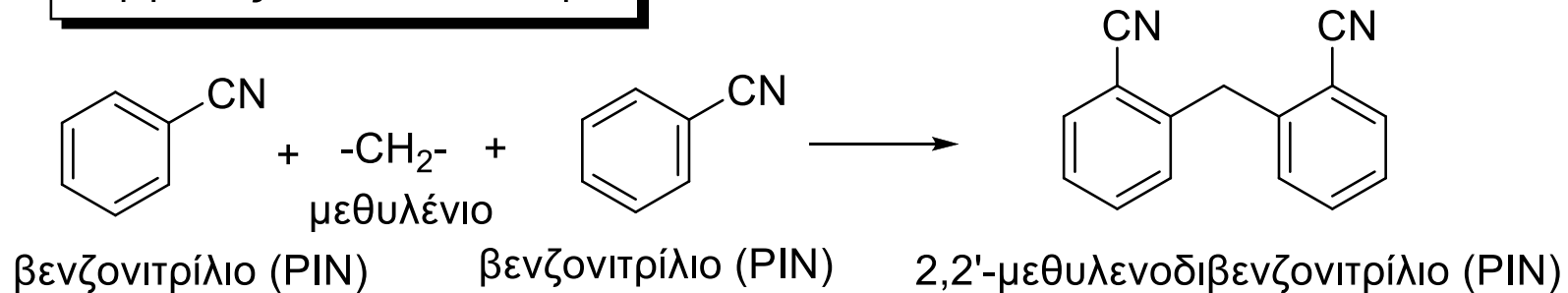
2,3-διδιϋδροοξεπάνιο  
το πρόθεμα "διδιϋδρο"  
υποδεικνύει απώλεια δύο H  
"διυδρο", "διϋδρο" ή "δεϋδρο" για το αγγλικό "dehydro"  
Ο όρος "δεοξυ" για το αγγλικό "deoxy" έχει επικρατήσει



### Διεργασίες Σύζευξης

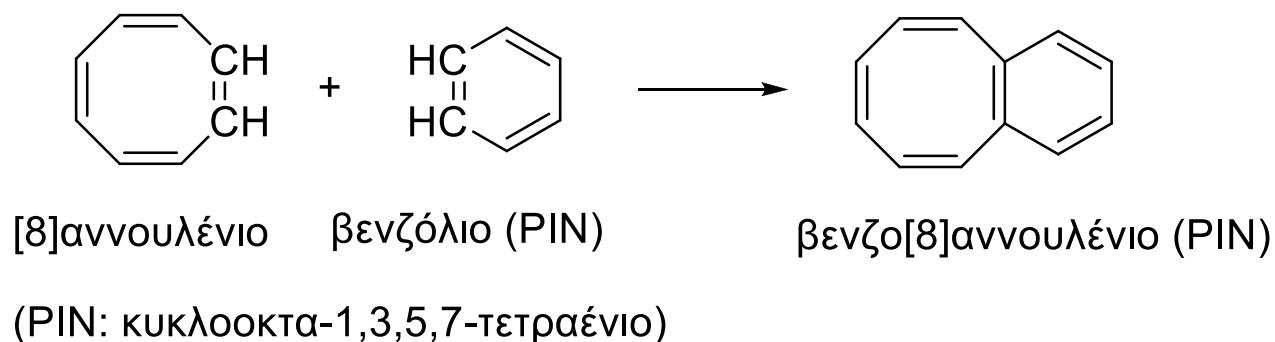
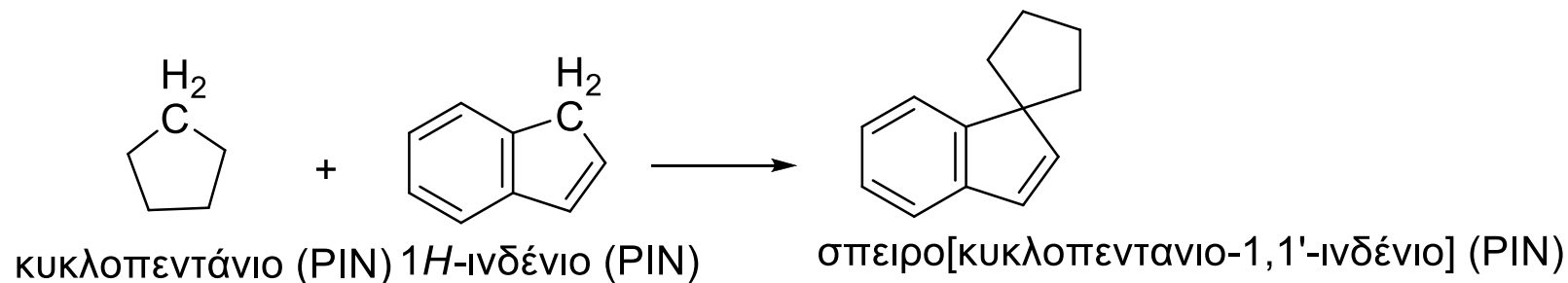


### Διεργασίες Πολλαπλασιασμού



Αν και οι παραπάνω δυο διαδικασίες μοιάζουν ως προς το αποτέλεσμα που αποφέρουν, η διαφορά τους έγκειται στο ότι η πρώτη ενώνει απευθείας συμμετρικά μητρικά υδρίδια με υποκατάσταση ενός υδρογόνου, ενώ η δεύτερη ενώνει συμμετρικά μητρικά υδρίδια μέσω ενός διδεσμικού ή πολυδεσμικού ενδιάμεσου υποκαταστάτη.

## Διεργασίες Συμπύκνωσης



Οι διεργασίες αυτές βοηθούν στην πολυπλοκότητα που εισάγουν τα πολυκυκλικά συμπυκνωμένα ή σπειρο-συστήματα. Υπάρχουν πάνω από 100.000 μητρικά υδρίδια κυκλικών και πολυκυκλικών ενώσεων με την πλειοψηφία να αποτελείται από αρωματικές ενώσεις (MANCUES, MAXimum Number of non-CUmulative Double bonds).

# Ονοματολογία Πολυκυκλικών Συμπυκνωμένων, Σπειρο και Ετεροκυκλικών Ενώσεων

- Βασίζεται στο σύστημα **von Baeyer** που καλύπτει πολυκυκλικά συμπυκνωμένα και σπειρο συστήματα (π.χ, δικύκλο[2.2.0]εξάνιο)
- Έχει επεκταθεί από άλλους (Radulescu, Patterson)
- Για τους ετεροκυκλικούς δακτυλίους εφαρμόζεται η ονοματολογία **Hantzsch–Widman** και οι νεώτερες επεκτάσεις της για δακτυλίους μέχρι 10 μέλη



The Nobel Prize in Chemistry 1905  
Adolf von Baeyer

## Adolf von Baeyer - Biographical






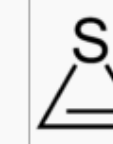
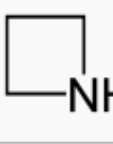
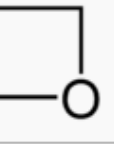




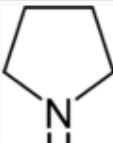


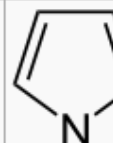
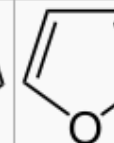
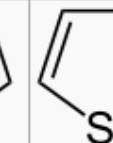
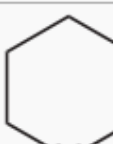
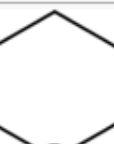
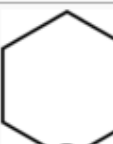
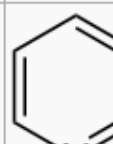
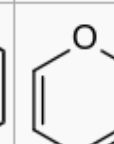
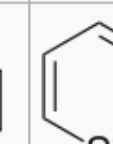
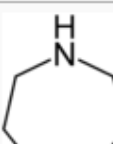
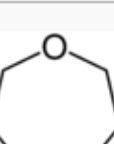
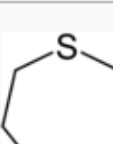
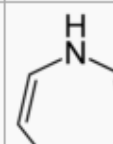
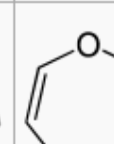
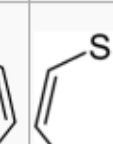


Johann Friedrich Wilhelm Adolf von Baeyer was born on October 31, 1835, in Berlin, as the son of Johann Jakob Baeyer and Eugenie née Hitzig. He came from a family distinguished both in literature and the natural sciences. His father, a lieutenant-general, was the originator of the European system of geodetic measurement. Even as a child Baeyer was interested in chemical experiments and at the age of twelve found a new double salt of copper.

## Σύστημα Ονοματολογίας Ετεροκυκλικών Ενώσεων Hantzsch–Widman

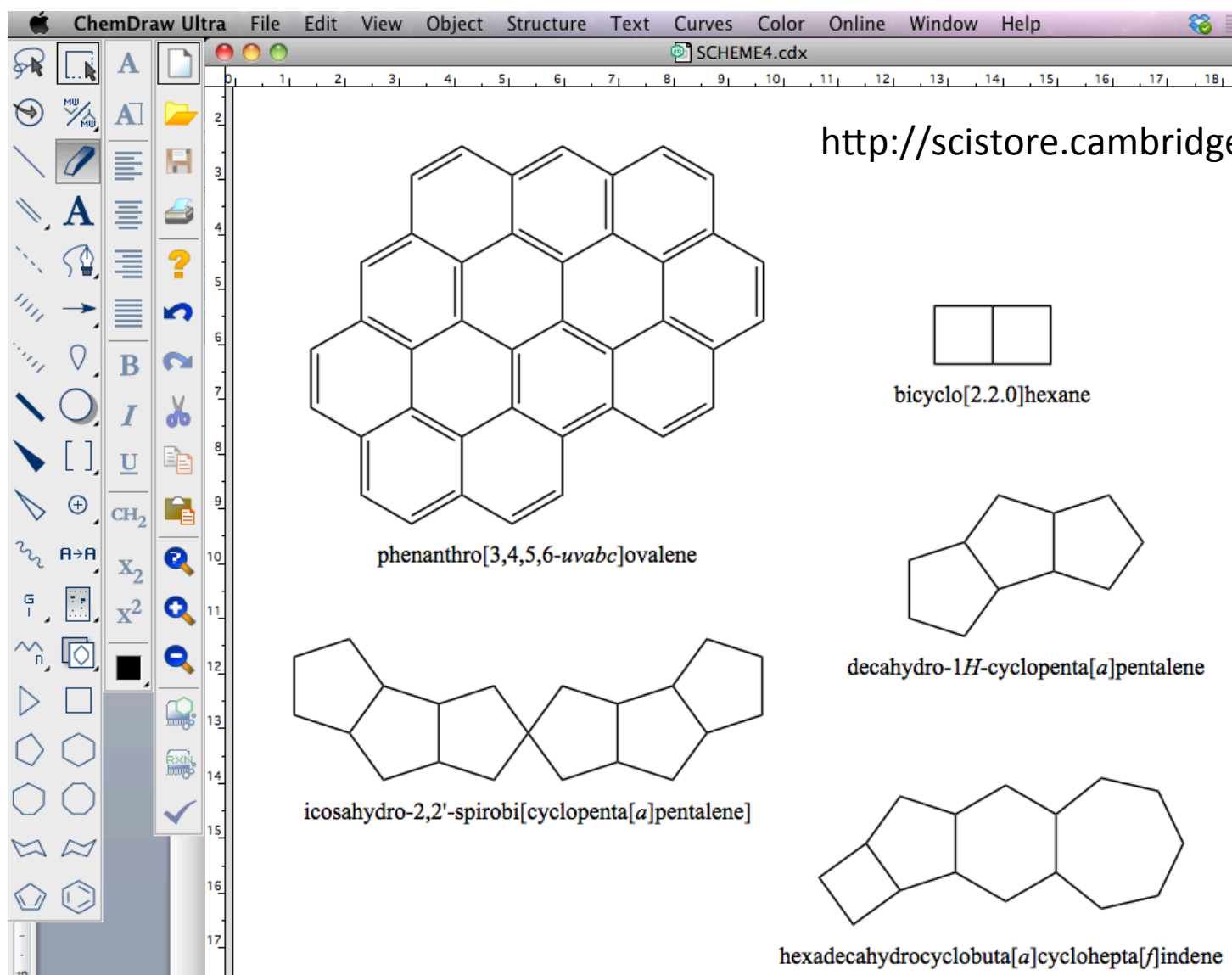
Ring size	Saturated	Unsaturated
3	-irane (-iridine)	-irene (-irine)
4	-etane (-etidine)	-ete
5	-olane (-olidine)	-ole
6A O, S, Se, Te; Bi, Hg	-ane	-ine
6B N; Si, Ge, Sn, Pb	-inane	-inine
6C B; F, Cl, Br, I; P, As, Sb		
7	-epane	-epine
8	-ocane	-ocine
9	-onane	-onine
10	-ecane	-ecine

Element	Prefix	Element	Prefix
Fluorine	fluora	Arsenic	arsa
Chlorine	chlora	Antimony	stiba
Bromine	broma	Bismuth	bisma
Iodine	ioda	Silicon	sila
Oxygen	oxa	Germanium	germana
Sulfur	thia	Tin	stanna
Selenium	selena	Lead	plumba
Tellurium	tellura	Boron	bora
Nitrogen	aza	Mercury	mercura
Phosphorus	phospha		

Heteroatom	Saturated			Unsaturated		
	Nitrogen	Oxygen	Sulfur	Nitrogen	Oxygen	Sulfur
3-Atom Ring	Aziridine	Oxirane	Thiirane	Azirine	Oxirene	Thiirene
						
4-Atom Ring	Azetidine	Oxetane	Thietane	Azete	Oxete	Thiete
						
5-Atom Ring	Pyrrolidine	Oxolane	Thiolane	Pyrrole	Furan	Thiophene
						
6-Atom Ring	Piperidine	Oxane	Thiane	Pyridine	Pyran	Thiopyran
						
7-Atom Ring	Azepane	Oxepane	Thiepane	Azepine	Oxepine	Thiepine
						

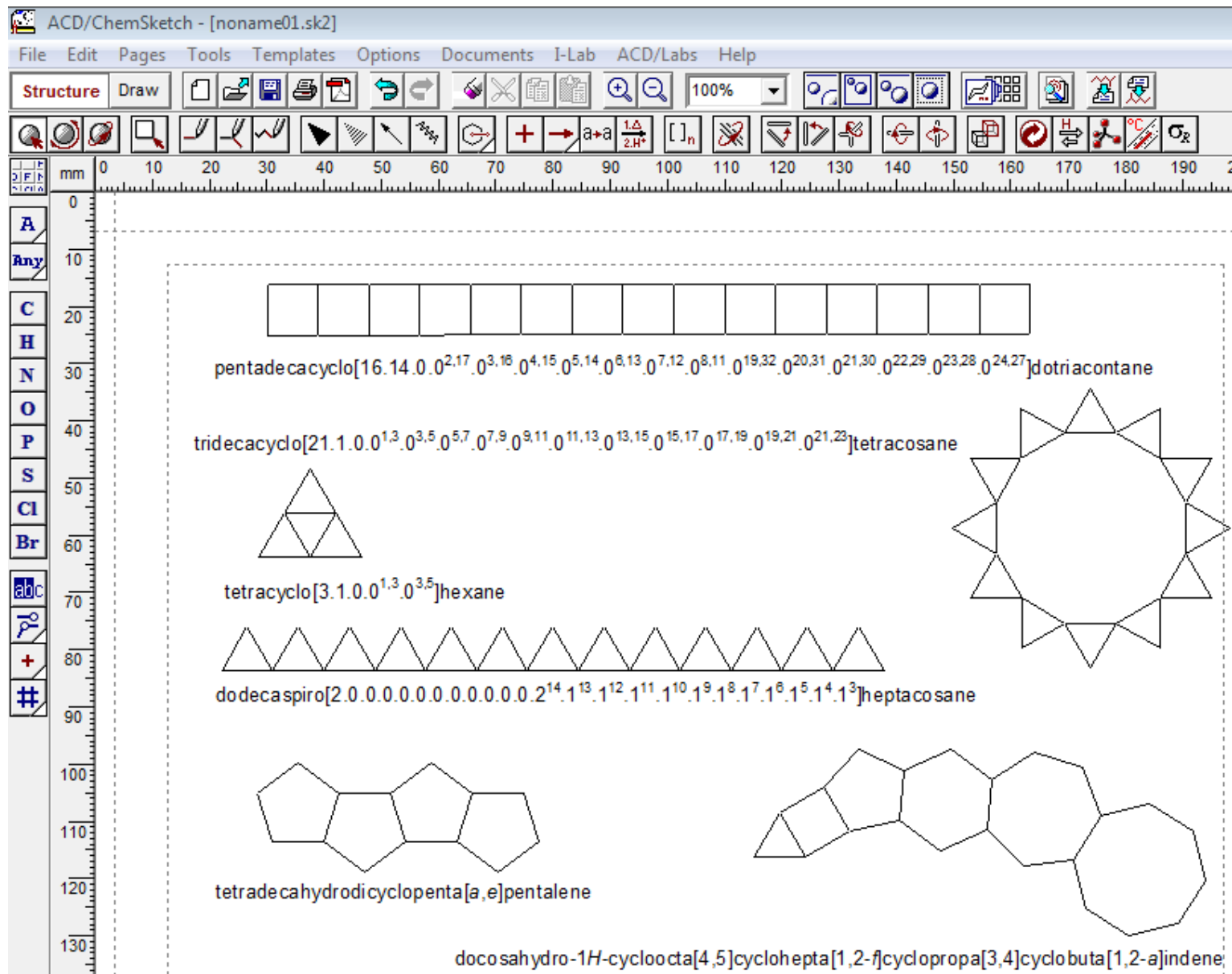
# Λογισμικά ονοματολογίας: ChemDraw v12.0

Δυνατότητα ονοματοδοσίας σε μέχρι 13 αρωματικούς δακτυλίους και σε μέχρι δίκύκλο συμπυκνωμένα και μονοσπειρο συστήματα



# Λογισμικά ονοματολογίας: ACD v6.0

Δυνατότητα ονοματοδοσίας σε μέχρι 15 συμπυκνωμένα και σπειρο συστήματα



# Λογισμικά ονοματολογίας: MarvinSketch

## Δυνατότητα αναγνώρισης ονομάτων ενώσεων στα Κινέζικα

The screenshot displays the MarvinSketch 5.11.4 software interface. The main window shows the chemical structure of sildenafil, a complex molecule consisting of a pyrazolo[4,3-d]pyrimidin-7-one core substituted with a methyl group, a propyl group, and a 4-(4-methylpiperazin-1-yl)phenyl group, which is further substituted with an ethoxy group and a methyl group on the piperazine ring.

In the center, the "Naming Options" dialog box is open, showing the following settings:

- Generate:
  - Preferred IUPAC Name
  - Traditional Name
- Single fragment mode

Buttons: **OK**, **Cancel**, **Restore Defaults**

On the right side, two "Naming" panels are visible:

- The top panel shows the "Preferred IUPAC Name = 5-(2-ethoxy-5-[(4-methylpiperazin-1-yl)sulfonyl]phenyl)-1-methyl-3-propyl-1H,6H,7H-pyrazolo[4,3-d]pyrimidin-7-one".
- The bottom panel shows the "Traditional Name = sildenafil".

The bottom of the interface features a toolbar with various chemical building blocks and a "2D" view indicator.

<http://opsin.ch.cam.ac.uk/index.html>

Διαδικτυακό λογισμικό για την αναγνώριση ονομάτων χημικών ενώσεων  
Εισαγωγή IUPAC ονομασίας => Εξαγωγή συντακτικού τύπου, InChI, SMILES, CML



## OPSIN: Open Parser for Systematic IUPAC nomenclature

University of Cambridge > Department of Chemistry > Unilever Centre for Molecular Science Informatics

Enter a chemical name into the box and then click submit. If the name can be interpreted, a depiction, a SMILES string, its InChI and its CML will be returned.

**Updated 14/1/14: JQuery update to fix bug with Google Chrome**

A paper describing OPSIN is now available from JCIM. If you have found OPSIN useful in your work citing it would be very much appreciated.

Depiction courtesy of the [Indigo Toolkit](#)



**InChI:**

InChI=1/C6H6/c1-4-2-6(4)3-5(1,4)6/h1-3H2

**SMILES:**

C123CC14CC43C2

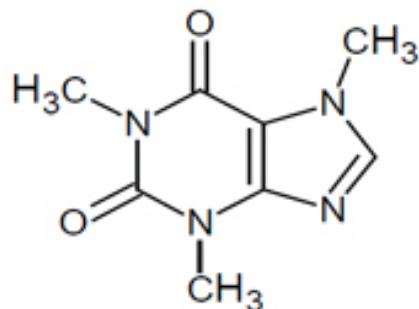
**CML:**

```
<cml convention="conventions:molecular" xmlns="http://www.xml-cml.org/schema" xmlns:conventions="http://www.xml-cml.org/convention/" xmlns:cml="http://www.xml-cml.org/cml">
  <molecule id="m1">
    <name dictRef="nameDict:unknown">tetracyclo[3.1.0.0(1,3).0(3,5)]hexane</name>
  </molecule>
</cml>
```

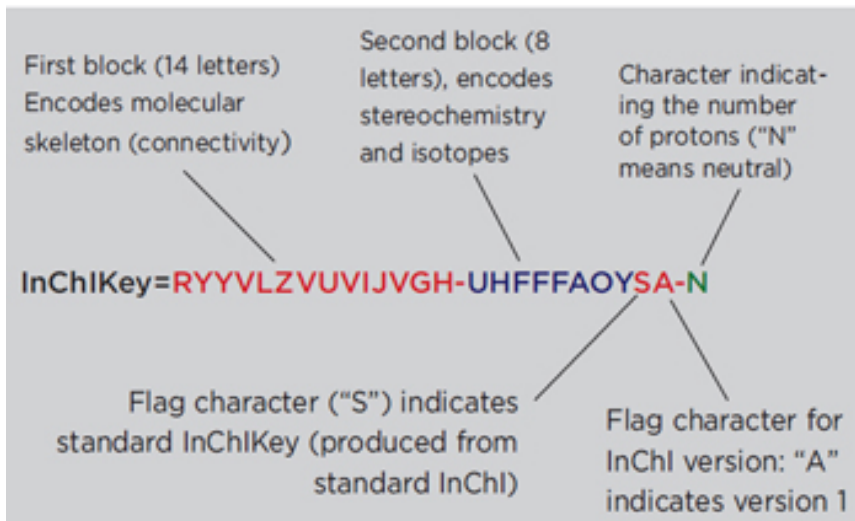


# InChI : IUPAC International Chemical Identifier

*caffeine*



InChI=1S/C8H10N4O2/c1-10-4-9-6-5(10)7(13)12(3)8(14)11(6)2/h4H,1-3H3



## CML (Chemical Markup Language):

Γλώσσα ανάλογη της html για την σωστή αναγνώριση και απεικόνιση δομών από ιστοσελίδες

**SMILES:** N1(C)C(=O)N(C)C=2N=CN(C)C2C1=O  
Simplified **M**olecular-Input **L**ine-**E**ntry **S**ystem

# Βιβλίο Χημείας Α' Λυκείου

## 6

### ΓΕΝΙΚΟ ΜΕΡΟΣ ΟΡΓΑΝΙΚΗΣ ΧΗΜΕΙΑΣ

#### ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

- 6.1 Εισαγωγή στην οργανική χημεία
- 6.2 Ταξινόμηση οργανικών ενώσεων - Ομόλογες σειρές
- 6.3 Ονοματολογία οργανικών ενώσεων
- 6.4 Ισομέρεια
- 6.5 Ανάλυση οργανικών ενώσεων
- Ερωτήσεις - προβλήματα

Ίσως το μεγαλύτερο πρόβλημα στη Χημεία Λυκείου, είναι οι λίγες διδακτικές ώρες και το γεγονός ότι πολλά σημαντικά θέματα δεν αποτελούν εν τέλει την διδαχθείσα ύλη.

# Βιβλίο Χημείας Γ' Λυκείου

## 5 ΟΡΓΑΝΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ

- 5.1 Δομή οργανικών ενώσεων - Διπλός και τριπλός δεσμός - Επαγωγικό φαινόμενο 189
- 5.2 Στερεοϊσομέρεια (εναντιομέρεια και διαστερομέρεια ) 201
- 5.3 Κατηγορίες οργανικών αντιδράσεων και μερικοί μηχανισμοί οργανικών αντιδράσεων 215
- 5.4 Οργανικές συνθέσεις - Διακρίσεις 237
  - Γνωρίζεις ότι: «Οπτική ισομέρεια *D* και *L* συμβολισμοί » 254
  - Ανακεφαλαίωση - Λέξεις κλειδιά 255
  - Ερωτήσεις - Ασκήσεις - Προβλήματα 257

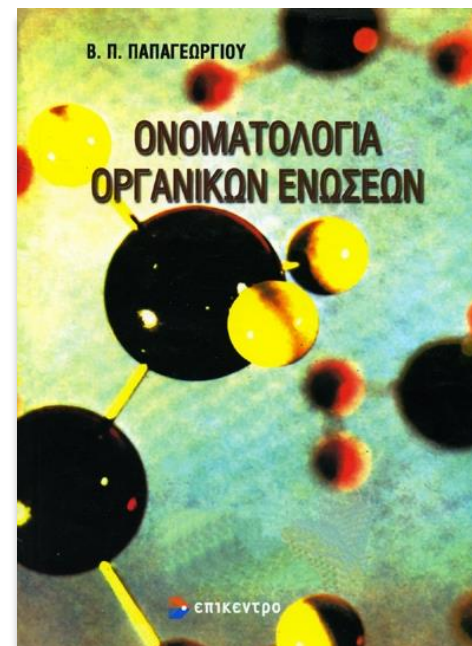


# Ελληνική Πανεπιστημιακή Βιβλιογραφία

- Η ονοματολογία εισάγεται μέσα από τα αντίστοιχα κεφάλαια των πανεπιστημιακών εκδόσεων (McMurry, P. Vollhardt και των παλαιότερων εκδόσεων).
  - Υπάρχει σχετικό βιβλίο (Β.Π. Παπαγεωργίου, 2005, Εκδόσεις Επίκεντρο)
  - Online Λεξικό Χημικών Όρων ( <http://www.chem.uoa.gr/vocabulary/login.asp> )
  - Η τάση που επικρατεί τα τελευταία χρόνια στην μετάφραση ξένων όρων ορολογίας και ονοματολογίας στα ελληνικά είναι να χρησιμοποιείται ελληνικός όρος που να βρίσκεται όσο το δυνατό πλησιέστερα στον ξένο όρο.
- 
- Για παράδειγμα, όροι όπως «οξικό αιθύλιο» έχουν εισαχθεί, ως μετάφραση του «ethyl acetate» προς αντικατάσταση του προγενέστερου και επικρατέστερου όρου «οξικός αιθυλεστέρας»

## ΓΝΩΜΗ:

Η συγγένεια ελληνικού και αγγλόφωνου όρου, ιδίως στην ορολογία, είναι πολύ χρήσιμη γιατί ο ερευνητής μπορεί να συσχετίσει τους δύο όρους άμεσα, ελαχιστοποιώντας την πιθανότητα παρανόησης. Όμως αυτή η αρχή καλό είναι να αφορά τους νέους όρους μόνο, ενώ η ορολογία και ονοματολογία βασικών εννοιών και ενώσεων η οποία έχει επικρατήσει στην ελληνική βιβλιογραφία θα πρέπει να παραμείνει ως έχει.



## Προτάσεις για μια Συστηματική Ελληνική Χημική Ορολογία

- Οργάνωση (υπό την αιγίδα της ΕΕΧ;) ενός σώματος εθελοντών κατά αντιστοιχία με τη λειτουργία της IUPAC με σκοπό την μετάφραση και συστηματοποίηση της ορολογίας και ονοματολογίας στα Ελληνικά που θα καλύπτει όλους τους τομείς της Χημείας.
- Ανοιχτή συμμετοχή και συγγραφή μεταφράσεων των έγχρωμων βιβλίων σε τύπο Wiki Books.
- Τακτικά συνέδρια με σκοπό την επικύρωση των προτάσεων που έχουν γίνει από τους μεταφραστές και επίλυση των προβλημάτων
- Ιδιαίτερα για την ονοματολογία χημικών ενώσεων στα Ελληνικά, προτείνετε η δημιουργία ενός απλού διαδικτυακού και ανοιχτού λογισμικού, με σκοπό την μετατροπή με συστηματοποιημένο τρόπο της αγγλικής ονοματολογίας στα Ελληνικά. Και πάλι στα πλαίσια εθελοντικής δουλειάς από ειδικούς ερευνητές/καθηγητές, με εμπειρία σε κάθε ξεχωριστό τομέα οι οποίοι θα εισάγουν τους σωστούς όρους στην πλατφόρμα του λογισμικού.

Όλα τα παραπάνω μπορούν να αναπτυχθούν σταδιακά, επεκτείνοντας το εύρος και την κάλυψη κάθε τομέα σε διαδοχικά βήματα με βάση ένα χρονοδιάγραμμα.