

**IUPAC Divisioona VIII (Kemian nimistö ja rakenteiden esittäminen)
Divisioonakomitean kokous 3-4.8.2014 Metallasyklityöryhmän kokous 2.8.2014, Bangor,
UK. Matkakertomus**

Risto Laitinen, Epäorgaanisen kemian laboratorio, Molekyyylimateriaalien tutkimusyksikkö, Oulun yliopisto

Osallistuin Bangorissa, Walesissa järjestettyyn IUPAC:n nimistödivisioonan komitean kokoukseen Suomen kansallisena edustajana ja metallasyklityöryhmän kokoukseen sen IUPAC:n nimittämänä jäsenenä. Matkakulut katettiin pääsääntöisesti IUPAC:n metallasyklityöryhmän toimintaan osoitetuista määrärahoista, mutta lisämajoituskulut divisioonakomitean kokouksen osalta katettiin Suomen kemian seuran määrärahoista.

Divisioonakomitea VIII kokoukseen osallistuivat divisioonan presidentin Dr. Karl-Heinz Hellwichin ja sihteerin Dr. Ture Damhusin lisäksi yhdeksän jäsentä. Seuraavat projektit ovat divisioonassa on tällä hetkellä aktiivisia:

InChI (2007-052-1-800) (International Chemical Identifier): Hankeen todettiin etenevän hyvin ja se alkaa saada myös laajempaa huomiota. Mm. Chemical Abstracts Service on myös ottamassa InChI:t käyttöön, joskin menetelmän käyttökelpoisuutta on vielä parannettava. Viime vuoden aikana systeemiä on alettu laajentaa makromolekyyleihin ja biologisiin molekyyleihin.

Orgaanisten yhdisteiden suositeltavat nimet ("Preferred names", 2001-043-1-800): Uudistettu laitos Orgaanisten yhdisteiden nimistöstä (ns. Sininen kirja) ilmestyi vuonna 2014. Sen yhteydessä alettiin hanke, jonka tavoitteena oli valita yhdisteille suositeltava nimi lukuisista mahdollisista systeemattisista nimistä. Tämän tavoitteena on mahdollistaa yksikäsitteisten ja yksien nimien käyttäminen esimerkiksi lainsäädännössä.

Syklisten peptidien nimistö (2004-024-1-800)

Fosforia sisältävien biomolekyylien nimistö (2006-019-1-800): Tämä hanke edellyttää päivittämistä ja työryhmän muodostaminen on käynnissä.

Hydro-prefiksin käytön vertaaminen IUPAC:n, CAS:n ja Beilsteinin nimistöjärjestelmissä (2012-037-1-800): Työryhmän työ on loppuvaiheissaan ja artikkeli voi kohta olla valmis julkiseen arviointiin.

Hiilihydraattien nimistön päivittäminen (2012-039-2-800): Tässä hankkeessa korjataan ja päivitetään vuoden 1996 nimistöä. Hanke on edistynyt pitkälle.

Orgaanisen ja epäorgaanisen kemian nimistön lyhyet oppaat (2010-055-1-800): Lyhyet oppaat, jotka kattavat oleellisesti kemian nimistön, ovat ilmestyneet tai ilmestymässä *Pure and Applied Chemistry-lehdessä*.

Poydristen boraanien nimistö (2012-045-1-800): Työryhmä on tuottanut artikkelin, joka on jaettu divisioonakomitean jäsenille kommentoitavaksi.

Epäorgaanisten yhdisteiden suositeltavat nimet (2006-038-1-800): Hanke on edennyt pitkälle, mutta joitain perusongelmia on vielä ratkaistava. Esimerkiksi, mitä triviaalinimiä sallitaan suosituimmaksi nimeksi. Toinen kysymys on, milloin käytetään koostumukseen perustuvaa nimeä ja milloin rakenteeseen perustuvaa nimeä. Oma kysymyksensä on, onko epäorgaanisille yhdisteille tarpeen antaa suosituksia, mitä nimistöjärjestelmää kulloinkin käytetään.

Reaktiodiagrammien graafinen esittäminen (2003-045-3-800/2012-033-1-800)

Siirtymämetallimetallasykliä nimistö (2013-030-1-800): Hanke on käynnissä, edistynyt hyvin ja sen on tarkoitus valmistua vuoden 2015 aikana. Työryhmän kokous pidettiin 2.8.2014 ja sen jäsenet ovat (Prof. Alan Hutton, Prof. Edwin Constable, Prof. Ebbe Nordlander ja Prof. Risto Laitinen). Kokoukseen osallistui myös muita divisioonakomitean kokouksen osaanottajia.

Flavonoidien nimistö (2009-018-2-800): Tämän hankkeen dokumentti on lähetetty julkiseen arviointiin kommentoitavaksi.

Koordinaatiopolymeerit ja metalli-orgaaniset rakenteet (2009-012-2-200): Tämä hanke on hiljattain päätynyt ja sen loppudokumentti on julkaistu.

Biologisesti kiinnostavat pienet molekyylit: Sanasto (2009-022-2-800)

Ohjeet nimien tavutukselle rivin lopussa.

Nanoputkien nimistö (2013-056-1-800): Kyseessä on uusi, vasta käynnistyvä hanke.

IUPAC:n ns. värillisten kirjojen hallinta (2013-052-1-024): Tämä hanke on usean divisioonan yhteinen. Tässä vaiheessa hanke keskittyy ns. vihreään kirjaan ja kultaiseen kirjaan.

Siirtymätilojen nimistö (2013-039-2-300)

Tulevaisuudessa käynnistetään joukko isoja hankkeita, joista tärkein on Epäorgaanisen nimistön (ns. Punainen kirja) päivittäminen ja uuden laitoksen tekeminen. Tavoitteena on saada uusi versio valmiiksi IUPAC:n satavuotisjuhlallisuuksiin vuonna 2019. Lisäksi harkitaan lukuisia hankkeita eri molekyylien stereokemian kuvaamiseksi.

Kokouksessa keskusteltiin myös tarpeesta jäsenistön päivittämiseksi. Syksyllä 2014 minut valittiin divisioonakomitean varsinaiseksi vuodeksi 2015 jäseneksi Prof. A Williamsin erottua terveyssyistä kesken toimikauden. Vuodesta 2016 alkaen komitea tarvitsee myös uuden varapresidentin ja sihteerin.

Divisioonan julkaisut (2013-):

Sininen kirja: IUPAC; H. A. Favre, W. H. Powell (Eds.): *Nomenclature of Organic Chemistry – IUPAC Recommendations and Preferred Names 2013*; xliii + 1568 pp., Royal Society of Chemistry, Cambridge, UK, 2014

Violetti kirja: www.iupac.org/fileadmin/user_upload/publications/e-resources/ONLINE-IUPAC-PB2-Online-June2014.pdf

Muut julkaisut:

- G. J. Leigh, Polymer Nomenclature, *Chem. Int.* **35**(4), 25–26 (2013)
- G. J. Leigh, The Special Case of Boron Hydrides, *Chem. Int.* **35**(5), 24–25 (2013)
- G. J. Leigh, Use of Abbreviations, Enclosing Marks, and Line-Breaks, *Chem. Int.* **35**(6), 24–25 (2013)
- A. Yerin, A. McNaught, S. Heller, InChI – the IUPAC International Chemical Identifier, *Chem. Int.* **35**(6), 12–15 (2013)
- B. F. Thomton, S. C. Burdette, Naming Superheavy Halogen and Noble Elements, *Chem. Int.* **35**(6), 26–27 (2013)
- R. Bucat, Visualization, Mental Models, and the "Reality", *Chem. Int.* **36**(1), 9–13 (2014)
- J. Meija, Symbols of the Elements, *Chem. Int.* **36**(1), 20–21 (2014)
- In Memoriam: Henri A. Favre 1926 – 2013, *Chem. Int.* **36**(2), 17–18 (2014)
- J. Meija, Symbols of the Elements, Part II, *Chem. Int.* **36**(3), 18–20 (2014)
- J. Meija, Symbols of the Elements, Part III (concluded), *Chem. Int.* **36**(4), 25–26 (2014)
- E. Scerri, On the Naming and Symbols of Elements 115 and 112, *Chem. Int.* **36**(4), 26–27 (2014)
- New Edition of the "IUPAC Blue Book" Nomenclature of Organic Chemistry – IUPAC Recommendations and Preferred Names 2013, *Chem. Int.* **36**(4), 22 (2014)
- Terminology of Metal-Organic Frameworks and Coordination Polymers, *Pure Appl. Chem.* **85**(8), 1715–1724 (2013)
- Abbreviations for Polymer Names, *Pure Appl. Chem.* **86**(6), 1003–1015 (2014)

IUPAC:n suosituksen käännökset saksaksi

Angewandte Chemie (Angew. Chem.) on 2002-2014 julkaissut 35 IUPAC:n suositusten ja teknisten raporttien saksannosta. Vuodesta 2013 lähtien on ilmestyneet seuraavat artikkelit:

Carsten Schmuck, Juliane Keilitz, Glossar von Begriffen zur Assoziatbildung und Selbstorganisation in den Polymerwissenschaften, *Angew. Chem.* **2014**, *126*, Nr. 11, 3078–3091. [Alkuperäinen artikkeli: *Pure Appl. Chem.* **85**, 463–492 (2013)]

Carsten Schmuck, Elisabeth Weber, Definition der Halogenbrücke, *Angew. Chem.* **2014**, *126*, Nr. 24, 6391–6392. [Alkuperäinen artikkeli: *Pure Appl. Chem.* **85**, 1711–1713 (2013)]

Roland A. Fischer, Inke Schwedler, Terminologie von Metall-organischen Gerüstverbindungen und Koordinationspolymeren, *Angew. Chem.* **2014**, *126*, Nr. 27, 7209–7214 [Alkuperäinen artikkeli: *Pure Appl. Chem.* **85**, 1715–1724 (2013)]