

270
中 国 化 学 会

有机化学命名原则

1980 1

科学出版社

中国化学会

有机化学命名原则

1980

科学出版社

1983

内 容 简 介

本书是我国1960年《有机化学物质的系统命名原则》的增修订本。由中国化学会推荐使用。这次修订中,增加了“变价化合物”和“天然物的命名”并对“立体化学的命名”重点进行了补充,其它章节也做了必要的增删和修改。

本书可供从事化学化工工作的教学、科研、生产人员和编译工作者使用。

中国化学会 有机化学命名原则

1980

责任编辑 王宝琰

科学出版社出版

北京朝阳门内大街137号

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1983年12月第一版 开本:850×1168 1/32

1983年12月第一次印刷 印张:2 7/8

印数:0001—15,200 字数:69,000

统一书号:13031·2449

本社书号:3365·13—4

定价: 0.58 元

前 言

我国有机化学的命名法,以往一直沿用《有机化学物质的系统命名原则》(1960)。随着有机化学学科的发展,该《原则》已经不能适应当前的需要,为此,中国化学会专门成立了“有机化学名词小组”,进行增补和修订。

从1978年开始,“小组”约请有关专家,分别对1960年《原则》中每个章节进行审查,并参考国际纯化学和应用化学联合会(IUPAC)1979年公布的《有机化学命名法》*提出增修订意见,曾两次印制《草案》分送国内大专院校、科研单位和有关专家征求意见。得到了大力支持。在此基础上召开了三次全国性的座谈会和多次小型专题讨论会,广泛听取化学界同志们的意见。而后参加修订工作的专家们,根据座谈会的精神,分别就各章节的修订意见写了文章,并在《化学通报》1980年8—12期上连载,再次征求化学界同志们的意见,最后由“有机化学名词小组”集体审查定稿。

《有机化学命名原则》(1980)重点修订了“化学介词”、“基的命名”、“支链和取代基的列出顺序”、“杂环化合物”的命名。扩充了“立体化学”的内容,增加了“变丰化合物”和“天然化合物”等章节。

参加起草和修订工作的有:王序、邢其毅、汪猷、黄耀曾、王葆仁、张滂、王积涛、梁晓天、黄文魁、陈光旭、胡宏纹、周维善、刘铸晋、屠传忠、王大琛、陆仁荣、程铁明、陈叔凤、王宝瑄等同志。

在修订过程中,得到了本学会杨石先理事长和柳大纲副理事长的热情关注。有关单位还曾多次组织小型讨论会,许多专家和专业工作者提供了宝贵的审查意见。谨此一并致谢。

《有机化学命名原则》(1980),虽经多次讨论,但由于有机化

* Nomenclature of organic chemistry sections A, B, C, D, E, F and H 1979 edition.

学本身内容繁杂所定原则也不可能把全部内容包括进去，有些原则还要适当照顾长期使用的习惯，有些原则还要通过在实践中进行检验。我们希望全国化学界的同志们，随时提出修改意见。以使《原则》日臻完善。

中国化学会有机化学名词小组

1982 年 2 月

目 录

1. 总则	1
1.1 基本方法	1
1.2 化学介词	1
1.3 基的命名	5
1.31 基	6
1.32 亚基	6
1.33 次基	9
1.34 游离基	10
1.4 名称中使用的符号	10
1.41 阿拉伯数字	10
1.42 汉文数字和天干	11
1.43 拉丁字母	11
1.44 希腊字母	11
1.45 标点符号	11
1.5 取代基位次在名称中的位置	12
2. 烃	12
2.1 烃的命名	12
2.11 碳原子数目的表示法	12
2.12 烃的词尾	13
2.13 碳链的编号	14
2.2 链烃	17
2.21 直链烃	17
2.22 支链烃	17
2.23 主链的择定	19
2.24 表示链异构的形容词	21
2.25 支链和取代基列出顺序	24

2.3	脂环烃	25
2.4	芳香烃	26
2.41	芳香烃的特定名称	26
2.42	稠环烃	28
2.5	桥烃	32
2.51	简单的桥环	32
2.52	桥环的编号	33
2.6	螺烃	33
2.61	简单的螺环	33
2.62	与稠环有关的简单螺环	34
2.63	复杂的螺环	34
2.7	联环烃	35
2.8	轮烯	37
3.	官能团和取代基的位次标明法和位次符号的省略法	37
3.1	官能团和取代基位次的选定	37
3.2	用编号来标明位次	38
3.3	用希腊字母来标明位次	39
3.4	位次符号的省略法则	39
4.	官能团和取代基	41
4.1	官能团和取代基的命名	41
4.2	复基的命名	43
5.	杂环化合物	43
5.1	基本杂环母核的特定名称	43
5.2	无特定名称的杂环	46
5.3	无特定名称的稠合杂环	47
5.4	使用较少而已见诸文献的杂环	50
6.	立体化学	51
6.1	次序规则	51
6.2	顺、反异构	56
6.3	手性中心的构型表示法	61

6.4 构象	64
7. 变丰化合物	66
7.1 同位素取代化合物	67
7.2 特定标记化合物	67
7.3 选择性标记化合物	67
7.4 非选择性标记化合物	68
7.5 全标记化合物	68
7.6 均匀标记化合物	69
7.7 贫同位素化合物	69
8. 天然化合物	69
8.1 甾族化合物	69
8.2 碳水化合物(即糖类化合物)	75
8.3 核酸	77
8.4 萜类化合物	77
8.5 有机酸	81

1. 总 则

从有机化学物质的结构出发,在对数目庞大的有机化合物进行命名时,尽可能地规定一些可以遵循的原则,从而使化合物名称和结构不致混淆,这样制定的化合物名称代表了它的组成和结构,且具有相应的系统性。

1.1 基本方法

(1) 将有机化合物的母体——链烃、环烃及杂环——系统地制定名称或给予特定名称。

(2) 规定母体的位次编排法。

(3) 将官能团、取代基以及由母体化合物所形成的“基”、“亚基”、“次基”都给出规定的名称。

(4) 规定立体化学中的命名方法。

(5) 规定一些代表结构组分结合关系的化学介词,以及代表结构异构的形容词。

(6) 归纳了天然物命名的基本原则。

具体命名的方法是以母体名称作为主体名,用介词连缀上取代基或官能团的名称,并按规定的顺序注出取代基或官能团的位次,而得到化合物的名称。

在有机化合物命名还未能实现一物一名的情况下,从结构的观点出发,多数有机化合物可以有几个名称,而命名原则要求选用较简便明确的名称(包括习惯使用的俗名)。

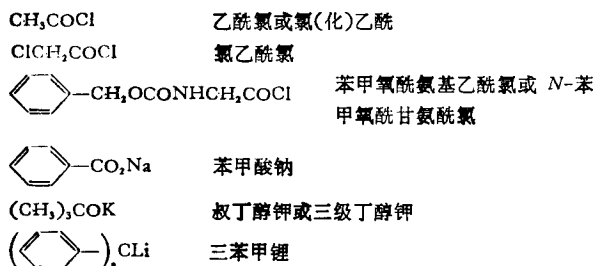
1.2 化学介词

化学介词是代表化合物中结构组分结合关系的连缀词。有机化学物质命名使用八个介词。在化合物的命名和结构关系不会混

淆时,介词往往可以省略。在可省略的情况下,为了说明的目的,介词被括在括号内。

化——有机化合物被视为两个基之间的化合所用的介词。这个介词往往是省略的。

例:

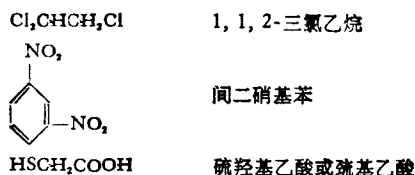


单取代的衍生物可以这样命名,但在多取代的情况下,命名是困难的。可作为取代产物命名,见介词[代]。

代——有机化合物作为一个母体化合物的氢、其它原子或基团被置换而命名所用的介词,使用时往往可以省略。

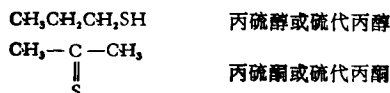
(1) 取代碳原子上的氢:

例:



(2) 硫置换碳原子上的氧原子。许多硫化物以相应的氧化物为母体,经硫置换而命名,硫的结构与原来的氧相同。

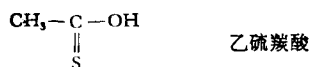
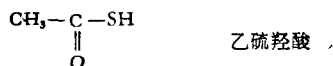
例:



(3) 硫置换羰基碳原子上的氧原子。羧酸分子中的羟基或羧

基上的氧原子分别被硫原子取代，可在硫字之后加上羟或羧字来命名，硫羟或硫羧应位于序数词(甲、乙、丙、……)之后，如果位于序数词之前，则是置换了碳原子上的氢原子(参见(1))。

例：



合——有机化合物被视为加成产物而命名所用的介词，加成的双方可以是分子或其中一方是基。

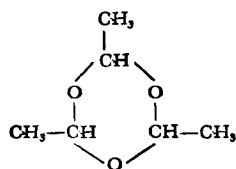
例：



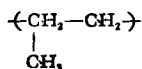
介词[化]和[合]是可以通用的，因为双键可以看作为基，但在它们之间，以使用合字较为合理。

聚——相同或不相同分子的聚合物命名时所用的介词。命名时在单体名称或链节名称之前冠以聚字。在较复杂的情况下，单体或链节名称需要加以括号括出，若已知聚合物的聚合程度时，在聚字前标出聚合数目。

例：



三聚乙醚



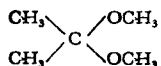
聚丙烯或聚 1, 2-亚丙基

缩——相同或不相同的分子之间失水、醇、氨等小分子而形成的化合物命名时所用的介词。

例:



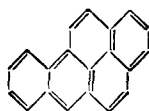
乙醛缩氨基脲



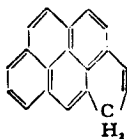
丙酮缩二甲醇

并——复杂的碳环或杂环化合物被视为由两个或多个环系之间通过两位或多位相互结合形成稠环所用的介词。

例:



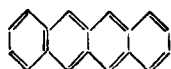
苯并[a]蒽



5H-苯并[cd]芘

线型的多苯并合的芳香体系除“蒽”和“蒽”有特定名称外,以并苯命名,同时标出苯环的数目。

例:



并四苯

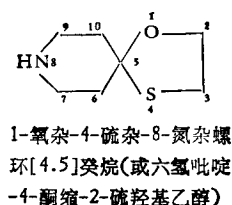
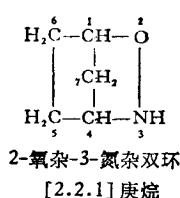
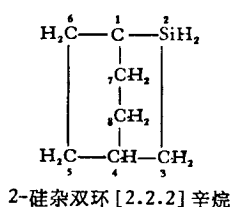


并五苯

杂——用于 von Bacyer 的杂环命名法的介词。简单的杂环已

有特定名称,许多较复杂的多环杂环体系可以用并合的杂环命名。但是仍有一些杂环化合物的命名难以包括在内,主要是多环的和螺环的杂环体系。von Bayer 命名是以相应的碳氢化合物为母体,定位以后,凡是碳氢基团为杂原子代替时,分别以位数和氧杂(—O—)、硫杂(—S—)、氮杂(—NH—)或硅杂(—SiH₂—)来命名。

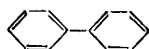
例:



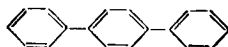
以上的例子说明,定位顺序除遵守母体环系的定位规定外,还要遵守杂原子氧、硫、氮命名的优先定位次序。

联——相同的环烃或杂环彼此以单键或双键直接相连,而形成集合环所用的介词。

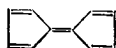
例:



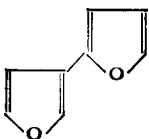
联(二)苯



联三苯



1, 1'-联(二)亚环戊二烯



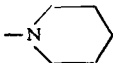
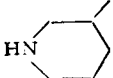
2, 3'-联(二)呋喃

1.3 基 的 命 名

从结构出发,命名中的基被区别为基(单价基)、亚基(双价基)和次基(三价基)。这一规定与无机化学物质命名中不同氧化级的酸类的命名相对应。

1.31 基：一个化合物从形式上消除一个单价的原子或基团构成为基，必要时加以定位，定位数位于基名之前。

例：

$-\text{CH}_3$	甲基
$-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	丙基
$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	异丙基
$-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	丁基
$-\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	异丁基
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ -\text{CHCH}_2\text{CH}_3 \end{array}$	2-丁基或 1-甲基丙基
$-\text{C}(\text{CH}_3)_3$	叔丁基或三级丁基
	苯基
$-\text{CH}_2$ 	苯甲基或苄基
$-\text{CH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$	烯丙基
$-\text{CH}=\text{CHCH}_3$	丙烯基
$-\text{CH}_2\text{COOH}$	羧甲基
$-\text{COCH}_3$	乙酰基
$-\text{N}=\text{N}$ 	苯偶氮基
$-\text{NH}_2$	氨基
$-\text{NHNH}_2$	肼基
$-\text{SH}$	巯基或硫基
	1-六氢吡啶基
	3-六氢吡啶基
$-\text{CH}_2\text{N}(\text{CH}_3)_2$	二甲氮(基)甲基
$-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$	2-羟乙基

1.32 亚基：一个化合物从形式上消除两个单价或一个双价的原子或基团构成为亚基。亚基有两种不同的结构：

(1) 两个价集中在一个原子上时，一般不要求定位，但有选择时以该原子的序数定位。

例：

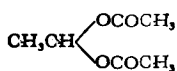
	亚甲基
	亚乙基
	亚异丙基
	1-甲基亚丙基
	苯亚甲基(亚苄基)
	亚环己基
	1,3-双亚环己基
	亚氨基

在以上的定位中,无定位数的就是1-位;定位数要求放在亚字前。胺基、肟基、环氧基等已习惯上通用,不再更动为亚基名称。

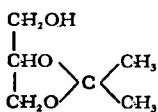
在结构中,亚基可以与另一原子或分别与两个相同的或不相同的原子结合,这一结合在必要时可用定位数字规定。

例:

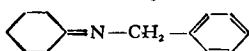
$\text{H}_2\text{C}=\text{C}(\text{CO}_2\text{C}_2\text{H}_5)_2$	亚甲基丙二酸二乙酯
	α -(或2-)亚环戊基环戊酮
	亚-3-环己烯基乙酸
	5-苯亚甲基-3,4-苯并-二氢吡咯酮



亚乙基二乙酸酯或二乙酸亚乙(基)酯



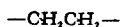
1, 2-O-亚异丙基甘油



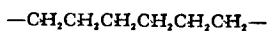
苯甲亚氨基环己烷或N-亚环己基苯甲胺

(2) 两个价分别在不同的原子上时, 一般要求定位, 定位数放在基名之前。

例如:



1, 2-亚乙基或二亚甲基



1, 6-亚己基或六亚甲基

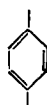
多亚甲基相当于英文命名中的 polymethylene, 但应使用定位的亚基。



邻亚苯基



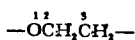
间亚苯基



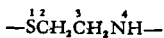
对亚苯基

亚苯基相当于英文命名中的 phenylene。总之, 亚基相当于英文命名中的字尾 -ylene 或 -ylidene。亚基还可以扩展用于含杂原子的基团。与杂环化合物的定位规定一致, 按 O、S、N、C 的先后次序。

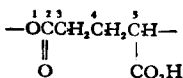
例:



1, 3-亚乙氧基

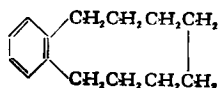


1, 4-亚乙硫醇氨基

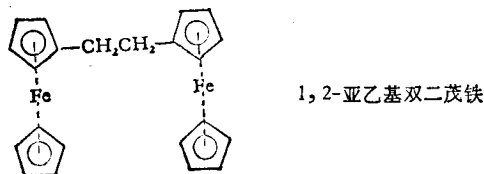
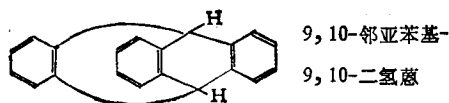


1, 5-亚(5-羧基)丁酰氧基

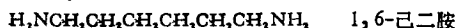
下面是一些命名的实例:



邻-1, 8-亚辛基苯或 1, 8-(邻亚苯基)辛烷或苯并环辛烯



已有更简便的命名时可不用亚基命名,例如:



1.33 次基: 一个化合物在形式上消除三个单价的原子或基团构成次基。命名中使用的次基限于三个价集中在一个原子上的结构。三个价分别位于两个原子(一个单价和一个二价)和分别在三个原子上的结构可以分别以亚基和一般的系统命名来命名。常见的次基为:



次基相当于英文命名中的 -ylidine 或 -ylidyne。以次基命名的例子为:

