

## (二) 有机化学命名原则

### 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
2.4.1	芳香烃的特定名称 .....	26
2.4.2	稠环烃 .....	28
2.5	桥烃 .....	32
2.5.1	简单的桥环 .....	32
2.5.2	桥环的编号 .....	33
2.6	螺烃 .....	33
2.6.1	简单的螺环 .....	33
2.6.2	与稠环有关的简单螺环 .....	34
2.6.3	复杂的螺环 .....	34
2.7	联环烃 .....	35
2.8	轮烯 .....	37
<b>3.</b>	<b>官能团和取代基的位次标明法和位次符号的省略法 .....</b>	<b>37</b>
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
<b>4.</b>	<b>官能团和取代基 .....</b>	<b>41</b>
4.1	官能团和取代基的命名 .....	41
4.2	复基的命名 .....	43
<b>5.</b>	<b>杂环化合物 .....</b>	<b>43</b>
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
<b>6.</b>	<b>立体化学 .....</b>	<b>51</b>
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
<b>7. 富丰化合物</b> .....	<b>66</b>
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
<b>8. 天然化合物</b> .....	<b>69</b>
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)。

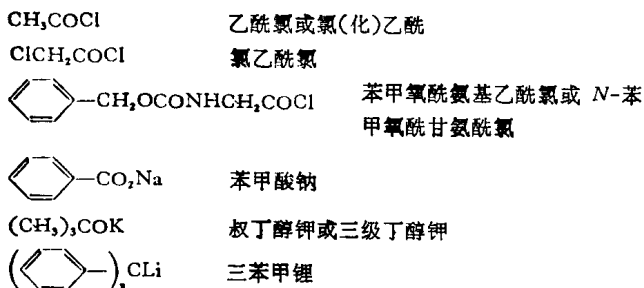
## 1.2 化学介词

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:

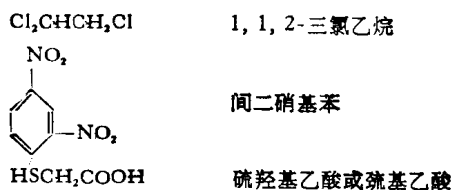


单取代的衍生物可以这样命名,但在多取代的情况下,命名是困难的。可作为取代产物命名,见介词[代]。

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。

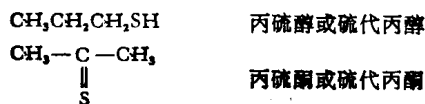
(1) 取代碳原子上的氢:

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。

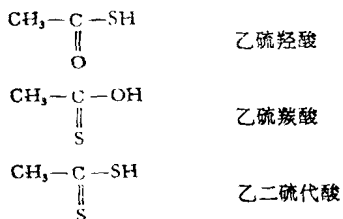
例:



(3) 硫置换羰基碳原子上的氧原子。羧酸分子中的羟基或羰

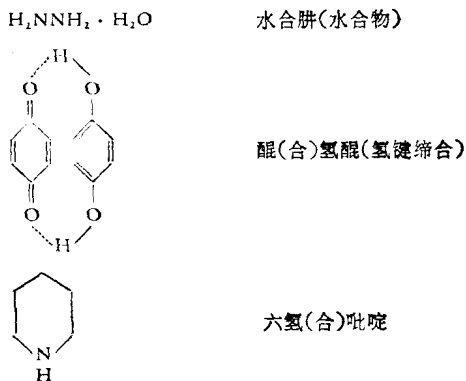
基上的氧原子分别被硫原子取代，可在硫字之后加上羟或羧字来命名，硫羟或硫羧应位于序数词(甲、乙、丙、……)之后，如果位于序数词之前，则是置换了碳原子上的氢原子(参见(1))。

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。

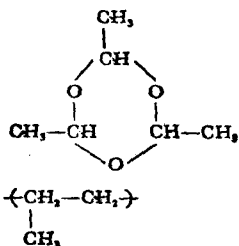
例:



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:

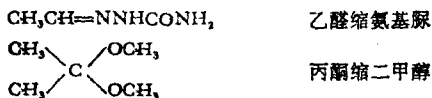


三聚乙醛

聚丙烯或聚 1,2-亚丙基

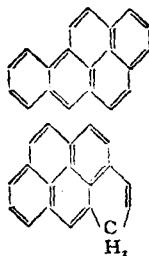
缩——相同或不相同的分子之间失水、醇、氨等小分子而形成的化合物命名时所用的介词。

例：



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] 蒽

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

例：



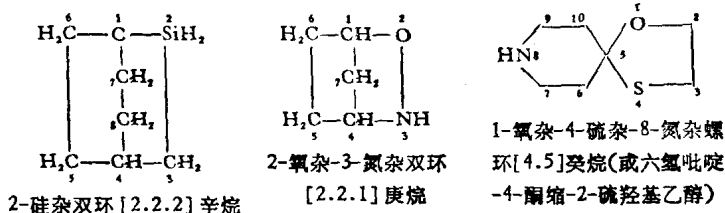
并四苯

并五苯

杂——用于 von Baeyer 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,主要是多环和螺环的杂环体系。von Baeyer 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(—SiH<sub>2</sub>—)来命名。

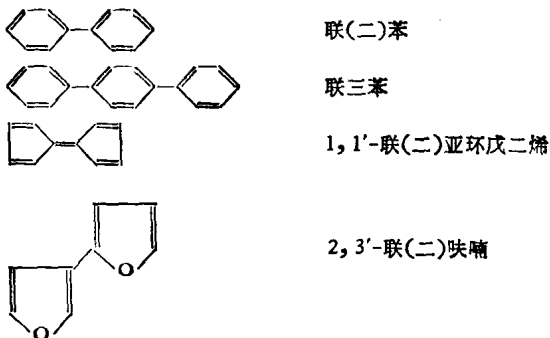
例:



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:







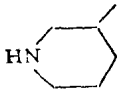
### 1.3 基的命名

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。

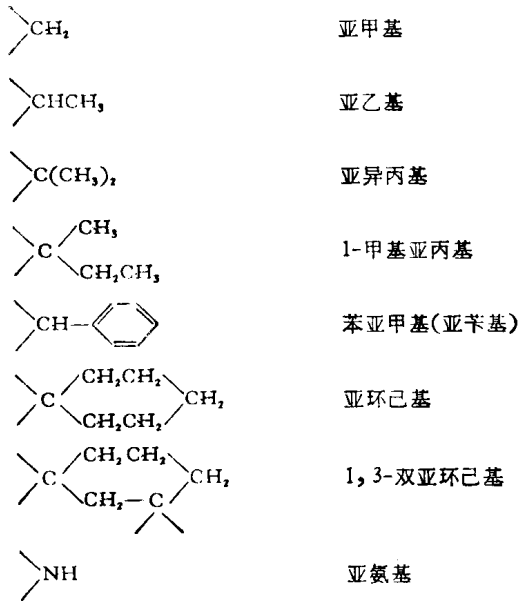
例：

$-\text{CH}_3$	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
$-\text{CH}_2\text{N}(\text{CH}_3)_2$	二甲氨(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。

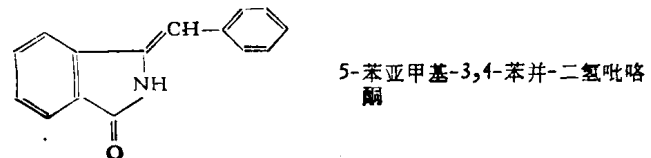
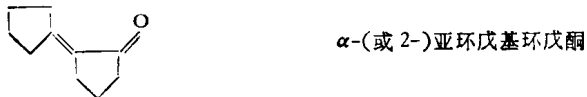
例：

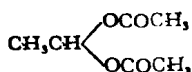


在以上的定位中,无定位数的就是 1-位;定位数要求放在亚字前。胺基、肟基、环氧基等已习惯上通用,不再更动为亚基名称。

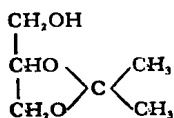
在结构中,亚基可以与另一原子或分别与两个相同的或不不同的原子结合,这一结合在必要时可用定位数字规定。

例:

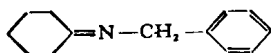




亚乙基二乙酸酯或二乙酸亚乙(基)酯



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:

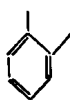


1,2-亚乙基或二亚甲基

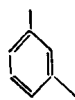


1,6-亚己基或六亚甲基

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



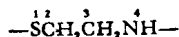
对亚苯基

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。

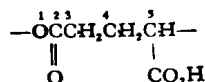
例:



1,3-亚乙氧基

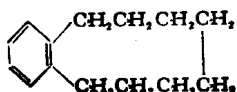


1,4-亚乙硫醇氨基

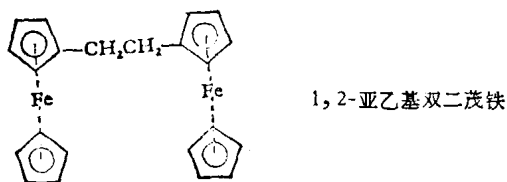
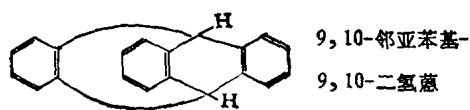


1,5-亚(5-羧基)丁酰氧基

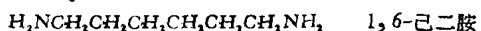
下面是一些命名的实例:



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为次基。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:

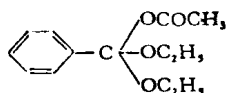
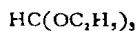
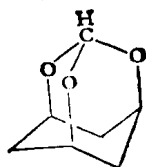


次基相当于英文命名中的 -ylidine 或 -ylidyne. 以次基命名的例子为:



这一类化合物中,有些在习惯上已被称为原甲酸酯,不需要以次甲基命名;而另一些既不便于用原酸命名,又不使用次基命名,则可命名为取代烃。

例:



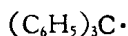
1,3,5-O-次甲基-顺,顺-1,3,5-环己三醇或顺,顺-1,3,5-环己三醇原甲酸酯或6,8,10-三氧杂-三环[3.3.1.1<sup>3,7</sup>]癸烷或6,8,10-三氧杂金刚烷

原甲酸乙酯

二乙氧基乙酰氧基苯甲烷

当碳的三个价与另一碳原子连接构成炔键时,应命名为炔不宜以次基命名。

**1.34 游离基:** 一个化合物从形式上消除一个单电子原子或基团而构成一个带有未成键的单电子基,命名为游离基(或自由基)。



甲基游离基

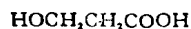
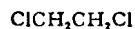
三苯甲基游离基

## 1.4 名称中使用的符号

### 1.41 阿拉伯数字\*

1、2、3、4、5……用来给主链或母体环编号,同时也用来表示取代基或官能团的位次。在命名中,位次符号和名称之间须加“-”半字线。读时,可加上一个“位”字。如一位、二位、三位等。

例:



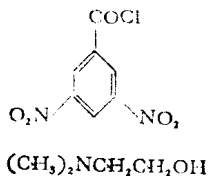
1,2-二氯乙烷

读作: 一、二位二氯乙烷

3-羟基丙酸

读作: 三位羟基丙酸

\* 螺、桥烃命名中,用阿拉伯数字表示螺原子间或桥上的碳原子数目,详见 2.5 和 2.6 节。



3, 5-二硝基苯甲酰氯  
读作: 三、五位二硝基苯甲酰氯

2-(二甲氨基)乙醇  
读作: 二位二甲氨基乙醇

### 1.42 汉文数字和天干

一、二、三……和天干甲、乙、丙……癸, 用来表示取代基或原子等的个数(见 2.11 节)。

### 1.43 拉丁字母

$a, b, c, d, \dots$  主要用来表示稠环化合物中, 被并合的母体环系边的位置(边数)。参阅 2.42 节。

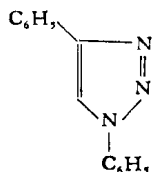
### 1.44 希腊字母

$\alpha, \beta, \gamma, \dots, \omega$ , 习惯上有两种含义。(1) 用来编号, 标明位次, 情况类同于阿拉伯数字。但要注意的是用于酸和杂环时  $\alpha$  位相当于第二位,  $\beta$  位相当于第三位, 依次类推。此外,  $\omega$  常用来指端位; (2) 在立体化学中, 常用来表示空间关系或立体异构。

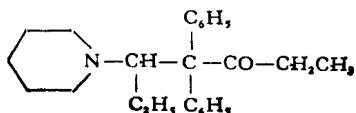
### 1.45 标点符号

名称中的标点符号有逗点和圆点两种, 阿拉伯数字之间, 用“右下角逗点”隔开, 则该数字指示位次; 若用“右下角圆点”隔开并加方括号, 则此处数字表示原子数目。即化合物名称中数字之间的不同标点符号, 指示了数字的不同含义。

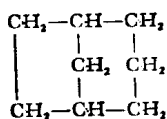
例:



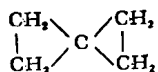
1, 4-二苯基-1, 2, 3-三唑



4, 4-二苯基-5-(1-六氢吡啶基)  
-3-庚酮



二环 [3.2.1] 辛烷

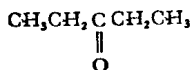


螺 [2.2] 戊烷

## 1.5 取代基位次在名称中的位置

取代基的位次一律标示在取代基名称或化合物名称之前。

例:



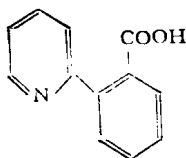
3-戊酮



2-丁烯



4-(1-甲基丙基)庚烷



2-(2-吡啶基)苯甲酸或 2-( $\alpha$ -吡啶基)苯甲酸

## 2. 烃

### 2.1 烃的命名

#### 2.1.1 碳原子数目的表示法

链烃分子内碳原子数目在十以内时,用天干表示;在十以外,则用汉文数字表示。

名称举例:

$n =$  碳原子总数

$n$	名称	英文名称	$n$	名称	英文名称
1	甲烷	methane	5	戊烷	pentane
2	乙烷	ethane	6	己烷	hexane
3	丙烷	propane	7	庚烷	heptane
4	丁烷	butane	8	辛烷	octane

n	名称	英文名称	n	名称	英文名称
9	壬烷	nonane	21	二十一烷	heneicosane
10	癸烷	decane	22	二十二烷	docosane
11	十一烷	undecane	23	二十三烷	tricosane
12	十二烷	dodecane	30	三十烷	triacontane
13	十三烷	tridecane	31	三十一烷	hentriacontane
20	二十烷	icosane(eicosane)	32	三十二烷	dotriacontane

在用数字表示时,除烷属烃可以略去碳字外,其它各属烃均应缀有碳字。

例:



## 2.12 烃的词尾

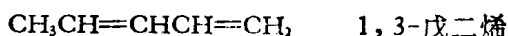
(一)饱和烃的词尾用烷,相当于英文名称词尾-ane。

例:



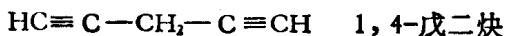
(二)含有碳碳双键的烃,用烯作为词尾,相当于英文名称词尾-ene。双键不止一个时,其数目用基数词二、三、四……等表示,词尾则为几烯。

例:



(三)含有碳碳三键的烃,词尾用炔,相当于英文名称词尾-yne。叁键不止一个时,其数目用基数词二、三、四……等表示,词尾则为几炔。

例:





同时含有双、叁键的烃\*, 词尾为“几烯几炔”, 若其中双键或叁键只有一个, 则“一”字从略。

$\text{CH}_2=\text{CHCH}_2\text{CH}=\text{CHC}\equiv\text{CH}$  1, 4-庚二烯-6-炔  
 不管炔键在主链上的位次如何, 炔总是放在名称的最后。

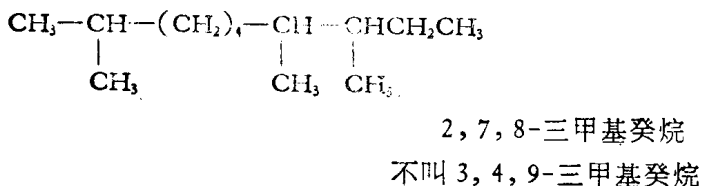
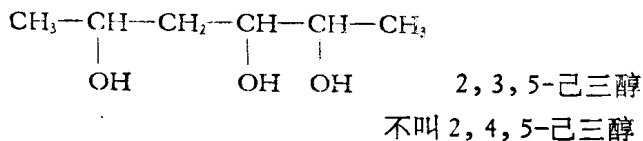
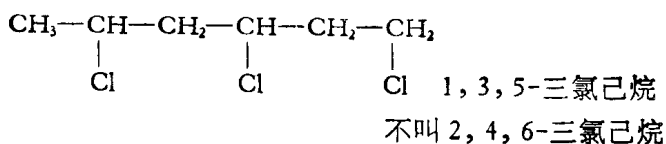
### 2.13 碳链的编号

#### (一) 选定编号的总则

链烃、对称环烃以及它们的衍生物, 在有几种编号的可能时, 应当选定使官能团及取代基具有“最低系列”的那种编号。

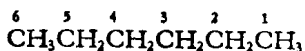
所谓“最低系列”指的是碳链以不同方向编号, 得到两种或两种以上的不同编号的系列, 则顺次逐项比较各系列的不同位次, 最先遇到的位次最小者, 定为“最低系列”。

例:



#### (二) 链烃的位次编号:

链烃中的主链从一端向另一端编号, 号数用 1, 2, 3, 4……等表示, 读成 1 位, 2 位, 3 位, 4 位等。



\* 同时含有双、叁键的烃, 按习惯命名为“几烯几炔”, 主链编号另有规定, 见 2.13 节。