

有 机 化 合 物 的 官 能 团

W.S.特拉哈诺夫斯基著

沈阳药学院有机化学教研室译

1980.5

**FUNCTIONAL GROUPS IN
ORGANIC COMPOUNDS**

Walter S. Trahanovsky

Associate Professor of Chemistry

Iowa State University of Science and Technology

PRENTICE-HALL, INC., ENGLEWOOD CLIFFS, N.J.

译 者 的 话

本书原著是洪盈教授为提高我教研室中、青年教师专业英语阅读水平，自 Foundations of Modern Organic Chemistry Series 中选出的—册英文书。该书紧紧围绕“官能团”这一有机化学中最突出的特征，重点讨论了（1）有机分子的结构和命名法；（2）物理性质与分子结构的关系；（3）官能团之间的化学相关性。取材精练、重点突出，说理浅显易懂，篇幅虽短，却能照顾全面。同时既能强调基本知识，又适当介绍近代题材。教研室决定译成中文作为学生学习有机化学的参考材料。在半年多全室共同学习的基础上，由武振卿、陈光文、张雅芳三同志将上述三部分内容译成初稿，并将书中习题作出答案附于最后。全书经洪盈教授全面审查修改后脱稿。

本书适于大学生、大中学校青年教师以及具有基本有机化学知识的科技人员阅读，是一本较好的自学材料。但由于我们中、外文水平不高，专业知识有限，错译之处在所难免，殷切希望读者批评指正。本书在翻译过程中得到罗旭副教授，张瑞华、杨维廉、金贵彬、陈英杰、李崇俊等老师多方面的指导和帮助，特此致谢！

译者

1980年5月17日

序 言

现代有机化学是以先进理论及技术武装起来的、内容广泛并具有极端重要性的一门学科。我们感到幸运的是，有机化学既是组织完善的又是发展较为成熟的科目，因而就比其它多种尚未充分发展的科目容易理解。本书的目的是把有机化学的主要特点介绍给初学者。这些特点把有机化学中的许多事实紧密结合起来形成一个完整的知识体系。

本书共分三章。第一章提出了有机化合物的结构及命名。我们希望学生在本部分的学习中，了解那些用以写出几乎所有有机化合物的结构式的基本规律。通过学习本章，他们应能很好地理解官能团的重要概念。这个概念可以使有机化学的多方面得到大大地简化。在第一章中还提出了一个体系严谨又全面深入的有机化合物命名法。它所包括的范围是如此的广泛，以致对学生来说，在贯穿整个学习过程中都是有用的。就是在学生已完成他在有机化学上的正规训练后，也将是有益的参考资料。

第二章牵涉到有机分子的物理性质。这一章有两个目的。首先，读者将体会到分子的真实性。我们期待学生能够发现有机分子的某些结构特征，尤其是其中的官能团如何在一种合理而又可预测的方式下影响分子的物理性质。第二个目的是介绍给学生一些以化合物的物理性质为基础的技术，如气—液色谱和各种波谱法。

在第三章将学生引导到有机化合物的化学反应上来。这样，就再一次强调了官能团的概念并揭示最重要的官能团的化学相互关系。

因此，从这本书中，学生将获得有机化学的全部概貌；同时也会开始意识到那些把有机化学中许多事实统一起来的重要特征。读完本书后，学生应处于这样一种很有利的地位，使他们能够在有机化学的多种主要方面继续得到充实和全面理解。

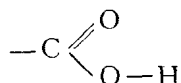
目 录

一 有机分子的结构和命名法	(1)
1-1 引言	(1)
1-2 碳架	(3)
1-3 仅含碳、氢原子的官能团	(4)
1-4 烃类命名法	(5)
1-5 连于分子骨架上的官能团	(19)
1-6 含碳、氢、氧、氮、卤素、硫和磷原子的有机官能团化合物命名法	(22)
1-7 顺—反或几何异构体命名法	(40)
1-8 不对称碳原子绝对构型的命名法	(42)
习题	(43)
参考文献	(49)
二 物理性质与分子结构的关系	(50)
2-1 引言	(50)
2-2 沸点	(50)
2-3 熔点	(53)
2-4 溶解度	(58)
2-5 气—液分配色谱法	(60)
2-6 紫外—可见(电子)光谱、红外光谱和核磁共振谱	(62)
习题	(81)
参考文献	(84)
三 官能团之间的化学相关性	(85)
3-1 官能团的反应	(85)
3-2 烯烃和炔烃的反应——加成反应	(85)
3-3 烯烃和炔烃的制备——消除反应	(90)
3-4 芳香族——取代反应	(93)
3-5 脂肪族的取代反应	(95)
3-6 脂肪族不饱和碳原子上的取代反应	(98)
3-7 醛类和酮类的加成反应	(101)
3-8 酸——碱反应	(104)
3-9 有机化合物的还原和氧化	(108)
习题	(113)
参考文献	(120)
习题答案	(121)

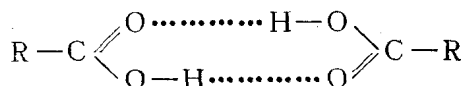
一 有机分子的结构和命名法

1—1 引言

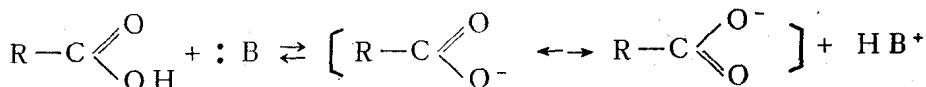
有机分子的结构由骨架（或构架）及“活性部位”两个重要部分构成。“活性部位”可为骨架的一部分，或是连于骨架之上。分子骨架通常是由碳原子组成，而“活性部位”往往由非碳原子组成。“活性部位”即**官能团**，它是分子中的原子或原子团，该分子所具有的一套特殊的理化性质与之密切相关。有机分子的骨架部分远比官能团“活性”小，因此整个分子的理化性质在相当大程度上受其所含官能团的影响。例如一个叫做**羧基**的常见官能团，其原子组成为：



羧基通过氢键易于缔合成环状二聚体，为此含羧基的分子往往比不含羧基的其他分子熔点、沸点高，此为羧基影响分子物理性质的一例。含羧基的分子大多均有这样一种化学性质，即



它们是酸性的，这是由于羧基易于失质子形成共振稳定化的羧基负离子的缘故。事实上通常



称含羧基的分子为**羧酸**。由此可予期并通常得到证实：羧酸具有较高的沸点、熔点，且有酸性。羧酸的其它许多理化性质均可因羧基的存在而得以合理解释。

羧基为一典型的官能团，同时由上述对其理化性质的简单讨论即可清楚地看到，研究有机化学可因官能团概念的应用而大为简化。事实上有机化学大都是研究官能团的理化性质，而不是一一研究单个分子的性质。诚然，连接官能团的原子团（即**烃基**）的确切结构也将会或多或少地影响官能团的活泼性。若烃基上还含有其他官能团，则这种影响更为明显。

本书共分三个主要部分。第一部分将讨论有机分子的结构和命名法。这部分将使学生得到这样的一般概念：即大多数最重要的有机分子是如何组合和命名的。摆在学生面前的是这些分子的不同结构特征和各种官能团，但并不十分注意它们对分子理化性质的影响。正如在未学习一台机器各部件功用之前首先熟悉它们的外观和名称一样。第二部分将讨论分子结构与物理性质之间的关系。在这部分也和有机分子结构部分一样，首要的注意力将集中在分子骨架上。这就是说本书内容的安排是首先讨论不具官能团或官能团就在骨架当中的分子，其后再讨论官能团连在骨架之上的分子。就物理性质这部分而言，如此入门方式是必要的，

因为关键是让学生看到增加一个官能团对分子原有物理性质会引起怎样地改变。另外，通过考虑无官能团的简单分子常可便于理解影响物理性质的各种分子结构状况。这样安排的另一个理由是使学生更易感觉到分子是真实物体，而不是空想的东西。他将醒悟到，分子的许多物理性质仅从考虑分子的重量、大小、形状和挠性就可得到明明白白地解释。

第三部分论述官能团的相互化学关系。既然分子中官能团的化学可决定分子的化学，所以这部分内容基本上不涉及没有官能团的分子。实际上第三部分是整个有机化学的核心部分。限于篇幅只能给予简短的介绍。我们对官能团化学的介绍并不是详细论述有机化合物化学的第一部分，而是讨论整个领域的概貌，并轻描淡写地谈及其中每个细目。希望学生现时在学到该领域最突出的特征时，他将获得官能团的概念运用在有机化合物化学中的感性认识。Foundation of Modern Organic Chemistry Series (《近代有机化学丛书》) 中其他一些著作：W. H. Saunders, Jr. 的 Ionic Aliphatic Reactions (《脂肪族离子反应》)、C. D. Gutsche 的 Chemistry of Carbonyl Compounds (《羰基化合物的化学》)、W. A. Pryor 的 Introduction to Free Radical Chemistry (《自由基化学引论》)、L. M. Stock 的 Aromatic Substitution Reaction (《芳香取代反应》)、K. L. Rinehart, Jr. 的 Oxidation and Reduction of Organic Compounds (《有机化合物的氧化与还原》)、C. H. DePuy 及 O. L. Chapman 的 Molecular Reactions and Photochemistry (《分子反应与光化学》)、R. E. Ireland 的 Organic Synthesis (《有机合成》) 等著作将对上述副题深入阐述，并使学生全面而又详细地了解有机化学中官能团的概念。本书仅提到少数几例官能团相互作用的一小部分机制性概念，因为它们将于《丛书》中 R. Stewart 的 The Investigation of Organic Reactions (《有机反应的研究》) 一书内介绍。

贯穿本书的重点是关于官能团的结构，也就是有机分子的结构。《丛书》的第一册 N. L. Allinger 和 J. Allinger 编著的 Structure of Organic Molecules (《有机分子结构》) 中，以近代波动力学的观点论述了原子和分子的结构。讨论有机分子时最重要的是学生始终要注意这方面的结构概念。但是有机化学家所最关心的分子结构是原子间相互联结的顺序。为了形象地表示这点，人们采用以短线代表一个单键（即代表一对电子）的简单平面结构式。因此 C_2H_6 和 C_2H_4 可用划线方式分别表示为：



另一方面，人们还想表示分子的立体结构，含碳碳双键的化合物是平面的，上述的短线结构式即很好地代表它们的立体结构式。但由碳碳单键构成的化合物其立体结构式则须采用特殊符号，比如用楔形、虚线表示，或用代表球体的圆圈表示。

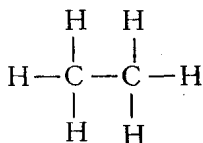


既使是在立体结构式中也无须指明轨道。然而学生始终应注意到它们的轨道图形，并应知道各种线型键是由何种杂化轨道构成以及它们的几何关系如何。当考虑几何异构体和写出共振结构式时这点尤为重要，因为共振发生前轨道必须作适当排列。

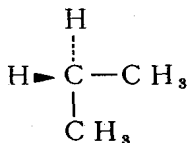
为简便起见，书中大多官能团均以短线式描述，然而学生要特别注意官能团的几何形状，并通晓它们的轨道图形。

1—2 碳架

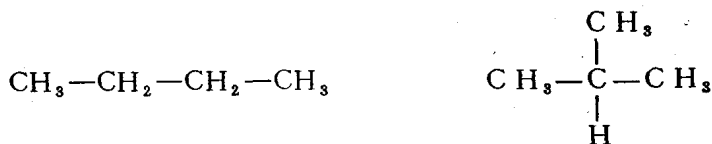
现今有机化合物数量已超过二百万，新化合物又不断涌现，其数量难以估计。有机化合物数目如此庞大的关键在于：（1）碳—碳原子间能形成较强的价键；（2）碳原子通常为四价。据此人们仅从碳、氢两种原子就能开始组合出有机化合物的结构。譬如，可以想象到的多碳原子中最简单的分子是由两个碳原子彼此连接而成，其中每个碳原子各连三个氢原子以



满足碳的四价。这个化合物早为人熟知，称为**乙烷**（Ethane）。由于分子中只含碳、氢两种原子，故属**烃类**（Hydrocarbons），又因仅含碳—碳单键，所以又属于**烷烃**（或称**石蜡烃**）。下一个想得到的、也是众所周知的烃是**丙烷** $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ 。由结构式和实验结果说明，乙烷和丙烷分子骨架成线型。虽然碳原子所连接的原子（或原子团）是按四面体构型排列，结果必然生成曲折形碳链，但曲线也还是一条线。四个碳原子的烷烃碳架有两种可



能的排列，一为直链，另一带支链，均属已知。直链的称**丁烷**，带支链的称**异丁烷**。丁烷和异丁烷的分子式相同，但却是两种不同的化合物。通常称这样的一些化合物为**同分异构体**。



当然碳架的排列还可以同样方式继续下去。若以碳碳单键连接且不成环，五个碳原子有三种排列，六个碳原子有五种，七个碳原子九种，十个碳原子 75 种，二十个碳原子 366, 319 种。可以肯定，烷烃 $\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$ 的所有异构体并非全然已知。上面提到的碳架排列仅是直链和带支链的，在纸面上并不局限于此，碳原子还可相互连接成单环、双环及他种结构形式。实

实际上大自然已将这些可能大都变为现实，自然界中大体存在以下几种基本碳架：



线型



分支型



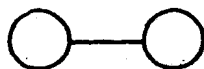
环型



双环



螺环



集合环

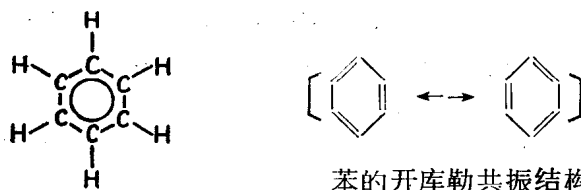
当然，在自然界中还存在着由上述基本碳架联结而成的结构体系。这些结构体系的专门实例及它们的命名规则将于1—4节中提出。

1—3 仅含碳氢原子的官能团

碳原子间除以单键联结外，还能以双键和三键相连。含碳碳双键的烃叫做**烯烃**，含碳碳三键的烃叫做**炔烃**。最简单的烯烃是乙烯 $\text{CH}_2=\text{CH}_2$ ，最简单的炔烃为乙炔 $\text{CH}\equiv\text{CH}$ 。烯烃通常又称作Olefins（成油气），炔烃通常又叫Acetylenes（乙炔类），因此炔烃中最简单的成员乙炔名称为Acetylene，而很少称之为Ethyne。乙炔是人们熟悉的气体，它可作为照明灯的燃料。碳碳双键和三键是仅含碳氢原子的官能团，并常为分子骨架的一部分。但它们并不总是处在主链之中，所以有时当成是连于分子基本骨架上的原子团就更合理些。作为官能团它们应具有某些独特的理化性质，就是说，几乎全部烯烃和炔烃都具有作为各自特征的某些理化性质（将在第二章和第三章中讨论）。

含重键的烃就氢而论是**不饱和的**。不饱和脂肪是含碳碳双键和三键的有机物，饱和脂肪

则是不含碳碳重键的。另一类很重要的不饱和烃是**芳香化合物***。苯 C_6H_6 是芳香化合物的母体，其分子为平面的，六个碳原子排列为正六边形，每个碳上连接一个氢原子。不饱和碳

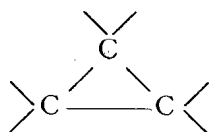


苯的开库勒共振结构式

原子的这种特殊排列形式构成一个异常稳定的结构单元。人们应当把苯环中六个碳原子看成为不可分割的统一整体，因此苯环常叫做一个**芳核**。当然芳核还有别种，但苯环是其中极其重要的一个。在讨论有机化学结构时，苯环被看成为一个结构单元。

尽管苯环中六个碳原子及其所构成的碳—碳键完全相同，但通常将其描述为三个碳碳双键和三个碳碳单键构成的六员环，称为苯的**开库勒结构式**。开库勒结构式可取之处是它能清楚地表明苯环存在六个 π -电子。此乃用正六边形内附一圆圈的六重对称符号所表示不出的。在运用开库勒结构时总是把它理解成两个或多个共振结构之一，从而暗示出苯环所有碳碳键是完全等同的。关于共振将在第二章2—6节中较详细的讨论。

芳香化合物和烯、炔一样也独具一些特殊的理化性质，因此芳核可看作是个官能团。饱和碳原子构成的环丙烷，因存在较大的小环张力能，所以比饱和烃活泼得多，并显示了某些



独特的理化性质。然而芳核和环丙烷三员环一般均不按官能团论处。

概括说来，有机分子碳骨架上有碳碳双键和三键两种排列方式看作官能团，至于其他排列，尽管也具有某些特征的理化性质，通常均不单独作为官能团来讨论。

1—4 烃类命名法

在科学方面准确交流正如生活各方面交流那样极为重要。对有机化学家来说，因为已知化合物数目庞大，可能有的有机化合物数目难以估量，所以准确地交流当然是个莫大的问题。有机化学家面临的任务是如何命名这些化合物才能使其准确结构在化学家之间无误地交流。其中可能的一种命名方法是给予某个化合物一个单一名称，就象东方语言那样，每个字基本上用一个符号记述。另一种命名法是用较小的单元组合成某一化合物的名称。这种命名法类似于西方语言，采用字母表中一系列字母拼写出一个单词。对比这两种命名法，看来字母表式命名法在学习和应用上毕竟是较容易的。国际纯化学和应用化学联合会(IUPAC)

* N.L.Allinger和J.Allinger《有机分子的结构》P50

承担了管理这种命名法的任务, IUPAC 的目的在于规定出较方便使用的有机化合物国际命名法, 按此法所得名称能准确地表达该化合物的结构。IUPAC 至今已出版公布了关于烃、杂环和含碳、氢、氧、氮、硫、硒和(或)碲官能团化合物的有机命名法, 有的发表在杂志上^[1,2], 有的以专著问世^[3,4]。这些命名规则是国际化学协会(IUC)于1933年出版发表的列日原则(Liège rules)的修订和扩展(IUC是IUPAC的前身)。列日原则又是在1892年日内瓦原则(Geneva rules)基础上制定的。目前关于有机化合物命名法相当完整地编辑物为 The Naming and Indexing of Chemical Compounds (《化学化合物命名和检索》), 刊载于CA1962年主题索引序言中^[5]。CA命名法即是IUPAC命名法, 只是为便于检索而作少数更动。上述CA中一文^[6]不仅包括CA和IUPAC命名法, 而且还有其他通用的命名法。其中又刊载了完善的有关命名法论文参考书目(P.67N)。

本文将介绍IUPAC命名法入门基础知识, 重点介绍其中最重要的命名原则, 并用实例说明。此外还列举一些应用更复杂规则的实例, 以便开扩学生眼界, 使其全面了解目前应用的各种命名法。起初学生只能深入地学习每节中的基本规则和应用实例, 而不能全面评价和充分领会它们, 然而在将来需要时, 他要重读并进一步学习, 特别是在遇到命名难题时更要参阅这些规则。通过学习表中所有的实例将会帮助学生注意到命名时将会遇到何种复杂问题, 并授与他们怎样解决这些复杂问题的思路。本文对命名法的介绍既不全面也不深入, 所以学生必须参阅原始文献, 尤其在命名复杂分子时更有必要。笔者希望不要参阅其他教科书, 因为这些书籍对命名法的介绍也不全面, 甚至大多有错, 或者提法不确切令人误解。此文不涉及杂环化合物的命名, 如需了解可参阅《丛书》中 E. C. Taylor 的 Heterocyclic Compounds (《杂环化合物》) 一书。另外, 有些特殊类型化合物, 如氨基酸等命名规则也不在本文中介绍。

IUPAC 最大的职责是总结编辑现行命名实践中的完善方法, 而不是杜撰新的命名法。常有一种误解, 认为IUPAC命名法仅包括系统命名原则, 而不采纳其他命名原则和好的实践方法。其实不然, 除个别常见的习惯命名方法未被IUPAC采用外, 大多数化合物均有两个或多个正式的IUPAC名称。若化合物俗名已长期广泛应用, 或为避免复杂的系统名称, 甚至许多俗名(即非系统名)也被IUPAC采用为正式名称。

有些次要的未被IUPAC或CA系统采用的实用命名法也是常见的。除IUPAC或CA系统外, 有机化学家可能遇到的命名惯例均在随后的讨论中注出, 并称为“非正式”命名法。

对于命名法的学习最好边用边记。勤奋用心的学生通过讨论、讲课和查阅文献等诸方面学习很快就能熟悉常用的命名方法。J.G. Trayham 的 Organic Nomenclature, A Programmed Introduction (《有机命名法程序引论》) 一书是上述命名法的补编, 它向读者推荐了练习有机命名法的一种简便方法。

A 烷——饱和链烃

表1-1列举了一些常见饱和直链烃 IUPAC 名称, 也有些不常见饱和直链烃的实例, 目的为说明烷烃命名的一般概况。由表可知, -ane 显然为烷烃名称词尾。表中前四个烷烃的名称为俗名。多于四个碳原子烷烃的名称是由希腊或拉丁数字加词尾 -ane 构成, 但应注意, 十一烷的名称不是 Hendecane, 而是 Undecane。表中的名称至少前十二个应熟记, 因为它

表1-1

饱和直链烃 IUPAC 名称

碳原子数	结 构 式	名 称	英 文 名 称
1	CH_4	甲烷	Methane
2	CH_3CH_3	乙烷	Ethane
3	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3$	丙烷	Propane
4	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	丁烷	Butane
5	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	戊烷	Pentane
6	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_4\text{CH}_3$	己烷	Hexane
7	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_5\text{CH}_3$	庚烷	Heptane
8	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_6\text{CH}_3$	辛烷	Octane
9	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_7\text{CH}_3$	壬烷	Nonane
10	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_8\text{CH}_3$	癸烷	Decane
11	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_9\text{CH}_3$	十一烷	Undecane
12	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{10}\text{CH}_3$	十二烷	Dodecane
13	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{11}\text{CH}_3$	十三烷	Tridecane
14	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{12}\text{CH}_3$	十四烷	Tetradecane
15	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{13}\text{CH}_3$	十五烷	Pentadecane
20	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{18}\text{CH}_3$	二十烷	Eicosane
21	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{19}\text{CH}_3$	二十一烷	Heneicosane
22	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{20}\text{CH}_3$	二十二烷	Docosane
23	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{21}\text{CH}_3$	二十三烷	Tricosane
30	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{28}\text{CH}_3$	三十烷	Triacontane
50	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{48}\text{CH}_3$	五十烷	Pentacontane
100	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{98}\text{CH}_3$	一百烷	Hectane
154	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{152}\text{CH}_3$	一百五十四烷	Tetrapentaconhectane

们经常出现在有机化学文献中。

由直链烷烃端基碳原子上失去一个氢原子即得直链烷基。烷基名称为相应烷名去掉-ane加-yl, 故烷基通称 Alkyl。带一个侧链烷烃的命名是在最长碳链名称前加侧链烷基名, 侧链位置由最长碳链标位指明。最长碳链称母体烃, 标位时编号方向应使侧链位次最低。带多个侧链的烷烃以同样方式命名, 但在母体烃标位时, 逐项对比两个编号方向, 选取在第一不同点侧链有最低位次的。这些规则的领会和应用见表1-2前三例。

表1-2

带侧链烷烃 IUPAC 名称

1. $\overset{1}{\text{CH}_3}\overset{2}{\text{CH}_2}\overset{3}{\underset{\text{CH}_3}{\text{CH}}}\overset{4}{\text{CH}_2}\overset{5}{\text{CH}_2}\overset{6}{\text{CH}_3}$ 3-甲基己烷 (3-Methylhexane)
2. $\overset{6}{\text{CH}_3}\overset{5}{\text{CH}_2}\overset{4}{\underset{\text{CH}_3}{\text{CH}}}\overset{3}{\text{CH}}\overset{2}{\underset{\text{CH}_3}{\text{CH}_2}}\overset{1}{\text{CH}_3}$ 2,4-二甲基己烷 (2,4-Dimethylhexane)
3. $\overset{10}{\text{CH}_3}\overset{9}{\underset{\text{CH}_3}{\text{CH}}}\overset{8}{\text{CH}_2}\overset{7}{\underset{\text{CH}_3}{\text{CH}}}\overset{6}{\text{CH}_2}\overset{5}{\text{CH}_2}\overset{4}{\text{CH}_2}\overset{3}{\text{CH}_2}\overset{2}{\underset{\text{CH}_3}{\underset{\text{CH}_3}{\text{C}}}}\overset{1}{\text{CH}_3}$ 2,2,7,9-四甲基癸烷
(2,2,7,9-Tetramethyldecane)
4. $\overset{9}{\text{CH}_3}\overset{8}{\text{CH}_2}\overset{7}{\text{CH}_2}\overset{6}{\text{CH}_2}\overset{5}{\underset{\text{CH}_2}{\underset{\text{CH}(\text{CH}_3)_2}{\text{CH}}}}\overset{4}{\text{CH}_2}\overset{3}{\text{CH}_2}\overset{2}{\text{CH}_2}\overset{1}{\text{CH}_3}$ 5-异丁基壬烷
(5-Isobutylnonane)
5. $\overset{1}{\text{CH}_3}\overset{2}{\text{CH}_2}\overset{3}{\text{CH}_2}\overset{4}{\underset{\text{C}(\text{CH}_3)_3}{\text{CH}}}\overset{5}{\text{CH}_2}\overset{6}{\text{CH}}\overset{7}{\text{CH}_3}$ 4-叔丁基庚烷
(4-tert-Butylheptane)
6. $\overset{8}{\text{CH}_3}\overset{7}{\text{CH}_2}\overset{6}{\text{CH}_2}\overset{5}{\underset{\text{CH}_2}{\underset{\text{CH}_3}{\text{CH}}}}\overset{4}{\underset{\text{CH}_2}{\underset{\text{CH}_3}{\text{CH}}}}\overset{3}{\text{CH}_2}\overset{2}{\underset{\text{CH}_3}{\text{CH}}}\overset{1}{\text{CH}_3}$ 2-甲基-5-乙基-4-丙基辛烷
(2-Methyl-5-ethyl-4-propyloctane)
(按复杂程度增加的顺序)
5-乙基-2-甲基-4-丙基辛烷
(5-Ethyl-2-methyl-4-propyloctane)
(按字母顺序)
- (注: 不叫4-乙基-5-异丁基辛烷。若两个最长链等长, 选侧链多者为母体)
7. $\text{H}_3\text{C}-\overset{1}{\text{CH}}\overset{2}{\text{CH}_2}\overset{3}{\text{CH}}(\text{CH}_3)\overset{4}{\text{CH}_3}$
 $\overset{11}{\text{CH}_3}\overset{10}{\text{CH}_2}\overset{9}{\text{CH}_2}\overset{8}{\text{CH}_2}\overset{7}{\text{CH}_2}\overset{6}{\underset{\text{CH}_2\text{CH}_3}{\text{CH}}}\overset{5}{\text{CH}_2}\overset{4}{\underset{\text{CH}_2\text{CH}_3}{\text{CH}}}\overset{3}{\text{CH}_2}\overset{2}{\text{CH}_2}\overset{1}{\text{CH}_3}$
6-(1,3-二甲基丁基)-4-乙基十一烷
[6-(1,3-Dimethylbutyl)-4-ethylundecane]
8. $\overset{1}{\text{CH}_3}\overset{2}{\text{CH}_2}\overset{3}{\text{CH}_2}\overset{4}{\text{CH}_2}\overset{5}{\text{CH}_2}\overset{6}{\text{CH}_2}\overset{7}{\text{CH}}\overset{8}{\text{CH}_2}\overset{9}{\text{CH}_2}\overset{10}{\text{CH}_2}\overset{11}{\text{CH}_2}\overset{12}{\text{CH}_2}\overset{13}{\underset{\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3}{\text{CH}}}\overset{14}{\text{CH}_2}\overset{15}{\text{CH}_2}\overset{16}{\text{CH}_2}\overset{17}{\text{CH}_2}\overset{18}{\text{CH}_2}\overset{19}{\text{CH}_2}\overset{20}{\text{CH}_3}$
 $\text{CH}_3-\text{CHCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
 $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CHCH}_3$
13-(1-甲戊基)-6-(4-甲戊基)二十烷
[13-(1-Methylpentyl)-6-(4-methylpentyl) eicosane]

带侧链烷烃除系统命名法外, IUPAC 对下述四个批准保留了俗名或半俗名* :

$(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_3$	异丁烷 (Isobutane)
$(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{CH}_3$	异戊烷 (Isopentane)
$(\text{CH}_3)_4\text{C}$	新戊烷 (Neopentane)
$(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	异己烷 (Isohexane)

这些俗名均有相应的词头, 用于非正式名称的词头有:

词头	含义
正 (normal-)	不带侧链的烃
异 (iso-)	含 $(\text{CH}_3)_2\text{CH}$ -基团并不带其他侧链的烃
新 (neo-)	含 $(\text{CH}_3)_3\text{C}$ -基团并不带其他侧链的烃

下列烷基俗名和半俗名也被IUPAC采用:

$(\text{CH}_3)_2\text{CH}-$	异丙基 (Isopropyl)
$(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2-$	异丁基 (Isobutyl)
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}-$ CH_3	仲丁基 (sec-Butyl)
$(\text{CH}_3)_3\text{C}-$	叔丁基 (tert-Butyl)
$(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{CH}_2-$	异戊基 (Isopentyl) **
$(\text{CH}_3)_3\text{CCH}_2-$	新戊基 (Neopentyl) **
$\text{CH}_3\text{CH}_2-\text{C}-$ CH_3	叔戊基 (tert-Pentyl) **
$(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$	异己基 (Isohexyl)

词头sec-和tert-分别为secondary和tertiary的缩写, 在非正式命名法中化学家经常又省略为s-和t-。

带侧链一价烷基名称是将侧链名称置于烷基名称前并指明位次。烷基标位以游离价碳原子为1。

若有两种或多种侧链时, 侧链名称顺序安排, (1) 按复杂程度增加顺序, (2) 按字母顺序。通常认为碳原子多的侧链较复杂。字母顺序是指侧链名称第一个字母的顺序, 复合基亦同样处理 (译注: 复合基dimethylpentyl第一个字母为d, 不是m)。烷基排列顺序的其他规则参见IUPAC文献^[1,3]。烷烃命名规则应用实例见表1-2。

*CA 称其为2-甲基丙烷、2-甲基丁烷等。

**非正式命名法往往用Amyl代替Pentyl, 尤其是在Isoamyl中更为常用。

B 烯和炔——不饱和链烃

烯(Alkenes)是含一个碳碳双键的烃,若含两个双键则称二烯(Alkadienes),含三个则称三烯(Alkatrienes)等等。同样,含一个碳碳三键的烃称炔(Alkynes),含两个称二炔(Alkadiynes),以此类推。不饱和直链烃的名称是将相应的烷烃名称词尾-ane改为-ene(烯)或-yne(炔),并在名称前指明不饱和键的位次。若分子中只含一个双键或三键,标位时应使不饱和键位次最低。若含几个不饱和键时,则将两个方向编号逐项对比,选择在第一个不同点重键有较低位次者。既含双键又含三键的烃名称词尾为-enyne,标位时应使重键有最低位次。若双键和三键都可给予最低位次,则选双键有最低位次者。

烯烃俗称Olefins,炔烃俗称Acetylenes。下述不饱和烃俗名是IUPAC批准采用的:

$\text{CH}_2=\text{CH}_2$	乙烯* (Ethylene)
$\text{CH}_2=\text{C}=\text{CH}_2$	丙二烯* (Allene)
$\text{CH}\equiv\text{CH}$	乙炔* (Acetylene)

带侧链不饱和烃是作为含最多不饱和键的最长直链的衍生物来命名,此链名称即为母体名称。一价不饱和烃基名称词尾为-enyl(烯基)、-ynyl(炔基)等。由一个碳原子上同时失去两个氢原子生成的二价基名称词尾为-ylidene(叉基)。

IUPAC保留了下列不饱和烃基的俗名:

$\text{CH}_2=\text{CH}-$	乙烯基 (Vinyl)
$\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2-$	烯丙基 (Allyl)
$\text{CH}_2=\text{C}-$ CH_3	异丙烯基 (Isopropenyl)

某些不饱和烃命名规则应用实例见表1—3。

表1—3 各种烯和炔 IUPAC 名称

1. $\text{CH}_3\text{CH}=\text{CHCH}_3$	丁烯-2 (2-Butene)
2. $\text{CH}_3\text{CH}=\text{CHCH}_2\text{C}\equiv\text{CCH}_3$	庚烯-2-炔-5 (2-Hepten-5-yne)
3. $\text{CH}_3\text{CH}=\text{CHCH}_2\text{C}\equiv\text{CH}$	己烯-4-炔-1 (4-Hexene-1-yne)
4. $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$ $\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$	3-乙基庚烯-1 (3-Ethyl-1-heptene)
5. $\text{CH}_3-\text{CH}=\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}_2\text{CH}_3$ $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	3-戊基庚烯-2-炔-4 (3-Pentyl-2-hepten-4-yne)
6. $\text{HC}\equiv\text{C}-\text{CH}=\text{CH}-\text{C}=\text{CH}_2$ $\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}-\text{C}=\text{CH}_2$ $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	6-甲叉-2-丙基癸三烯-1,3,7-炔-9 (6-Methylidene-2-propyl-1,3,7-decatrien-9-yne)

* 中文系统名与俗名相同

C 环烃

不带侧链脂环烃的名称是在同碳数开链烃名称前加词头cyclo- (环)。脂环烃结构式往往简化用多边形表示。一价脂环烃基标位时以游离价碳原子为1位。脂环烃命名规则应用例见表1-4。

表1-4

脂环烃 IUPAC 名称

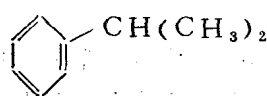
1.	$\begin{array}{c} \text{CH}_2 - \text{CH}_2 \\ \quad \quad \\ \text{CH}_2 - \text{CH}_2 \end{array}$	环丁烷 (Cyclobutane)
2.		环戊烯 (Cyclopentene)
3.		环癸炔 (Cyclodecyne)
4.		环癸烯-1-炔-6 (1-Cyclodecen-6-yne)
5.	$\begin{array}{c} \text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3 \\ \\ \text{Cyclopropyl} \end{array}$	1-环丙基丁烷 (1-Cyclopropylbutane)
6.	$\begin{array}{c} \text{CHCH}_3 \\ \\ \text{Cyclohexane} \end{array}$	乙叉环己烷 (Ethylidenecyclohexane)
7.	$\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}-\text{CH}_3$ 	6-环戊基庚二烯-1,4 (6-Cyclopentyl-1,4-heptadiene)

在芳香化合物中许多俗名被采用为正式名称。常见的芳香烃见表1-5。应注意，最常见的苯基用ph-、φ-或C₆H₅-表示，或用其中有三条线或一个圆圈以示π-电子的正六边形表示。

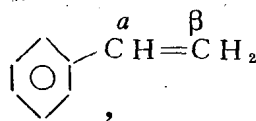
表1-5

常见芳烃和芳烃基IUPAC名称

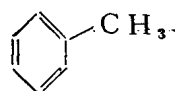
		苯 (Benzene)
		ph-, φ-, C ₆ H ₅ - 苯基 (Phenyl)
		邻苯撑基 (次苯基) (ortho-Phenylene)



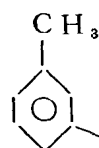
异丙苯 (Cumene)



$\varphi-\text{CH}=\text{CH}_2$ 苯乙烯 (乙烯苯, Styrene)

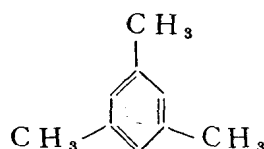


甲苯 (Toluene)

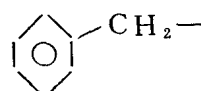


间二甲苯 (meta-Xylene)

m-Xylene



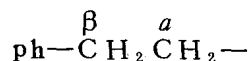
对称三甲苯 (Mesitylene)



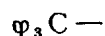
苄基 (Benzyl)



肉桂基 (Cinnamyl)



β -苄乙基 (β -Phenethyl)



三苯甲基 (Trityl或triphenylmethyl)

二元取代苯取代基位置除以邻 (ortho-, o-)、间 (meta-, m-)、对 (para-, p-) 表示外, 还可用于 1,2-, 1,3-, 1,4- 表示。不过前一种表示法不适用于多元取代衍生物。

D 桥环烃 (Bridged Hydrocarbons)

共用两个或多个碳原子的双环系统称桥环烃, 命名时将同碳数开链烃名称前冠以“二环” (bicyclo-), 在“二环”和母体烃名称之间插入三个数字, 按碳原子数目递减顺序指明三个桥上碳原子数, 以方括号括起来, 数字间用“,”号分开。这类烃的标位是从一个桥端开始沿最长桥到另一桥端, 再沿次长桥返回原桥端, 最后再标最短桥。对不饱和桥环烃标位, 不饱和键的位次有选择可能时才考虑给予最低位次。桥环烃上取代基位置由环的标位指明, 如有选择可能亦给予最低位次。上述规则及其他一些规则应用实例见表 1-6。桥环烃常用立体结构式表示。