

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)。

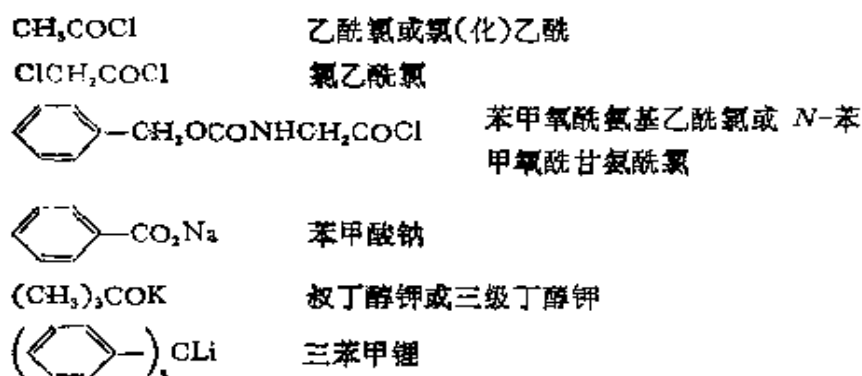
1.2 化学介词

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

清时,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:

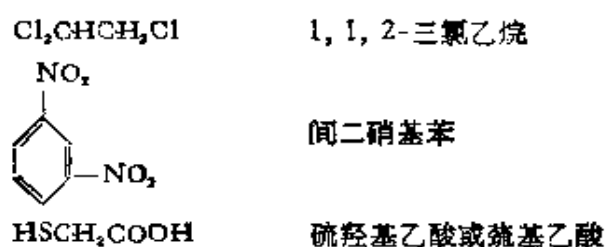


单取代的衍生物可以这样命名,但在多取代的情况中,命名是困难的。可作为取代产物命名,见介词[代]。

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。

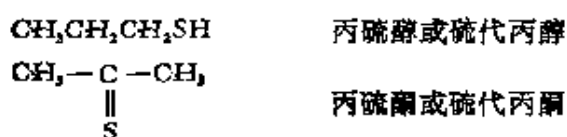
(1) 取代碳原子上的氢:

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。

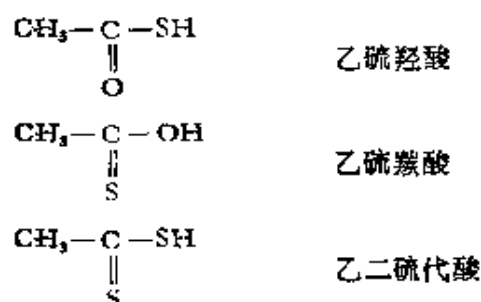
例:



(3) 硫置换羧基碳原子上的氧原子。羧酸分子中的羟基或羧

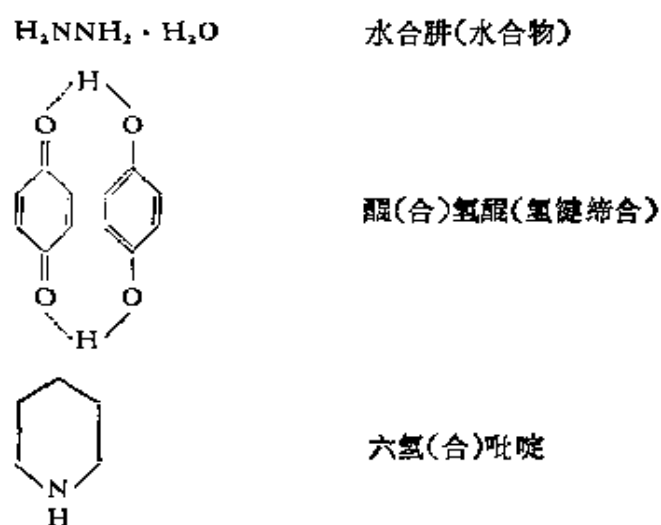
基上的氧原子分别被硫原子取代，可在硫字之后加上羟或巯字来命名，硫羟或硫巯应位于序数词(甲、乙、丙、……)之后，如果位于序数词之前，则是置换了碳原子上的氢原子(参见(1))。

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。

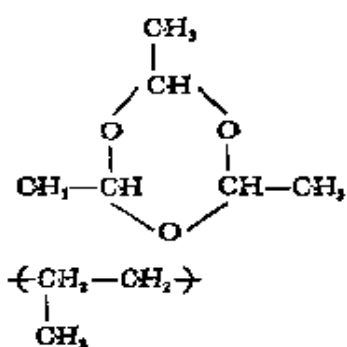
例：



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：

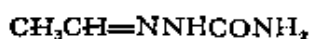


三聚甲醛

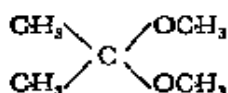
聚丙烯或聚1,2-亚丙基

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：



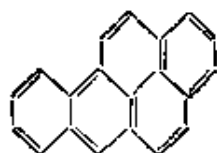
乙醛缩氨基脲



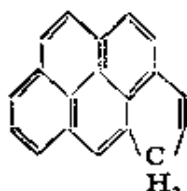
丙酮缩二甲醇

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：



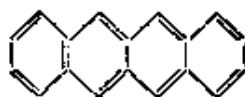
苯并[a]蒽



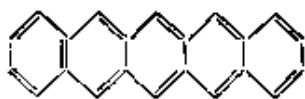
5H-苯并[cd]芘

线型的多苯并合的芳香体系除“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

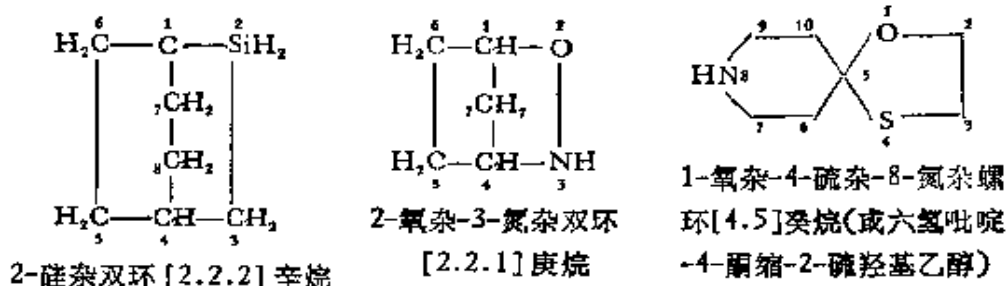


并五苯

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,主要是多环的和螺环的杂环体系。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(—SiH₂—)来命名。

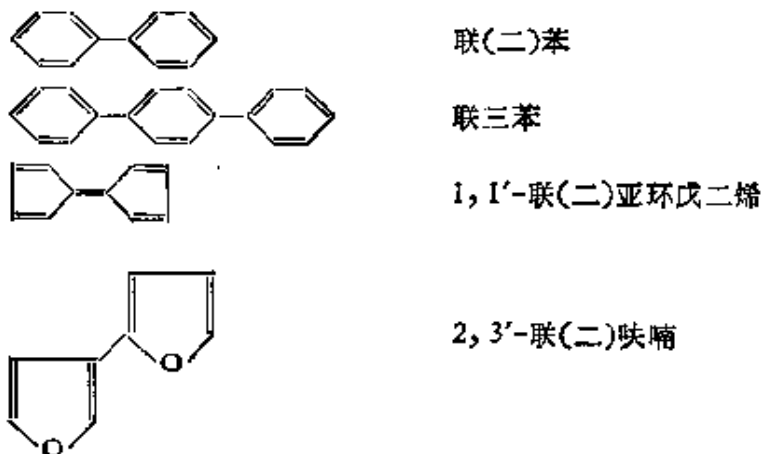
例:



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:

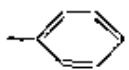


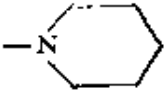
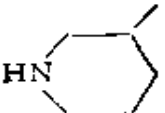


1.3 基的命名

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。

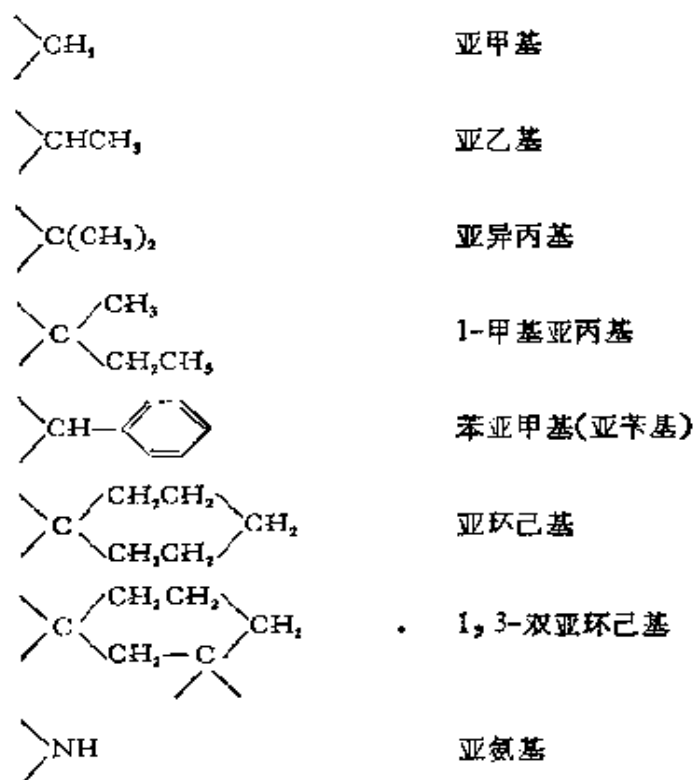
例：

$-\text{CH}_3$	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(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。

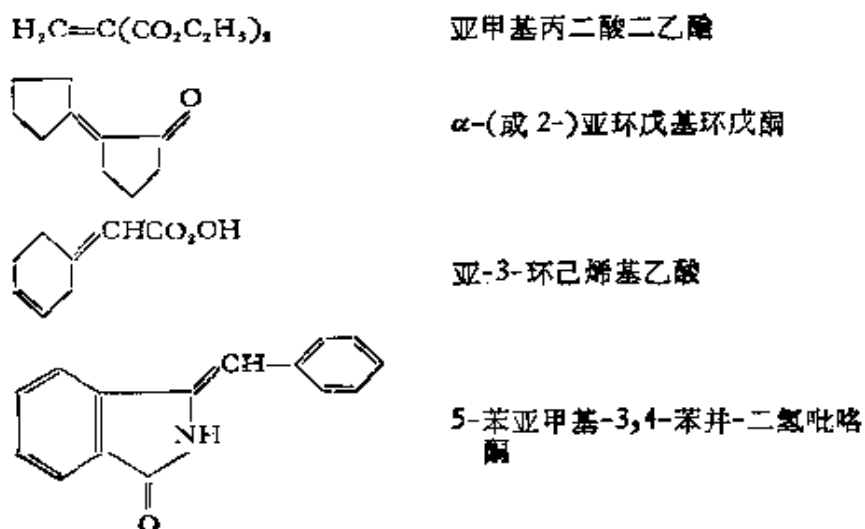
例：

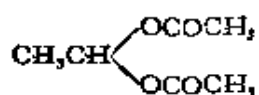


在以上的定位中，无定位数的就是 1-位；定位数要求放在亚字前。脞基、脞基、环氧基等已习惯上通用，不再更动为亚基名称。

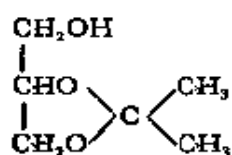
在结构中，亚基可以与另一原子或分别与两个相同的或不不同的原子结合，这一结合在必要时可用定位数字规定。

例：

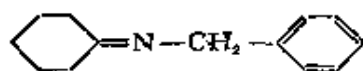




亚乙基二乙酸酯或二乙酸亚乙(基)酯



1,2-0-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:

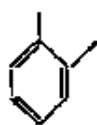


1,2-亚乙基或二亚甲基

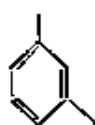


1,6-亚己基或六亚甲基

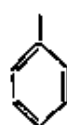
多亚甲基相当于英文命名中的 polymethylene,但应使用定位的亚基。



邻亚苯基



间亚苯基



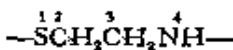
对亚苯基

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。

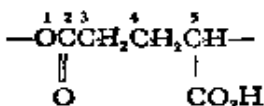
例:



1,3-亚乙氧基

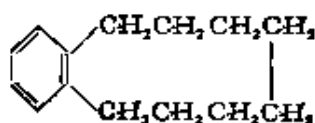


1,4-亚乙硫醇氨基

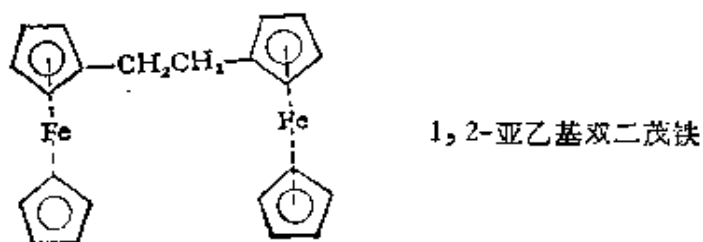
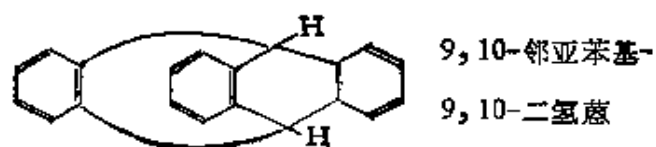


1,5-亚(5-羧基)丁酰氧基

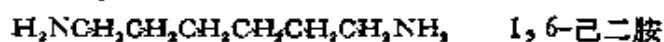
下面是一些命名的实例:



邻-1,8-亚辛基苯或1,8-(邻亚苯基)辛烷或苯并环辛烯



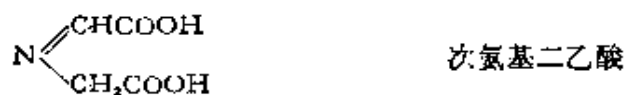
已有更简便的命名时可不用亚基命名,例如:



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:

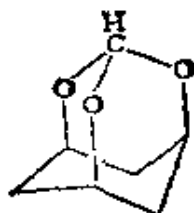


次基相当于英文命名中的 -ylidine 或 -ylidyne. 以次基命名的例子为:

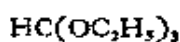


这一类化合物中,有些在习惯上已被称为原甲酸酯,不需要以次甲基命名;而另一些既不便于用原酸命名,又不便用次基命名,则可命名为取代烃。

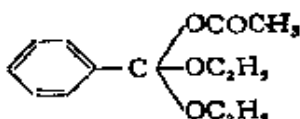
例:



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^{3,7}]癸烷或6,8,10-三氧杂金刚烷



原甲酸乙酯



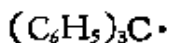
二乙氧基乙酰氧基苯甲酸

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



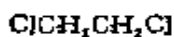
三苯甲基游离基

1.4 名称中使用的符号

1.41 阿拉伯数字*

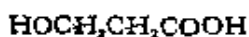
1、2、3、4、5……用来给主链或母体环编号,同时也用来表示取代基或官能团的位次。在命名中,位次符号和名称之间须加“-”半字线。读时,可加上一个“位”字。如一位、二位、三位等。

例:



1,2-二氯乙烷

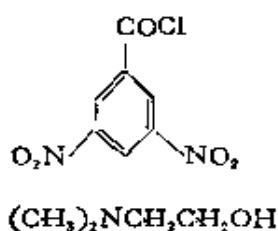
读作: 一、二位二氯乙烷



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, …… 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。

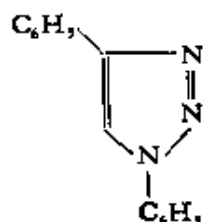
1.44 希腊字母

$\alpha, \beta, \gamma, \dots, \omega$ ，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 α 位相当于第二位， β 位相当于第三位，依次类推。此外， ω 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。

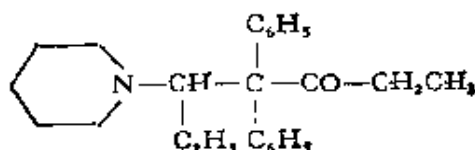
1.45 标点符号

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。

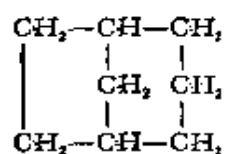
例：



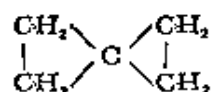
1,4-二苯基-1,2,3-三唑



4,4-二苯基-5-(1-六氢吡啶基)-3-庚酮



二环[3.2.1]辛烷

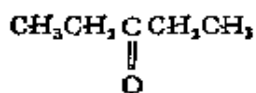


螺[2.2]戊烷

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:



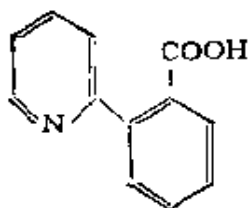
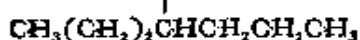
3-戊酮



2-丁烯



4-(1-甲基丙基)庚烷



2-(2-吡啶基)苯甲酸或2-(α -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

序 号	名 称	英文名称	序 号	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

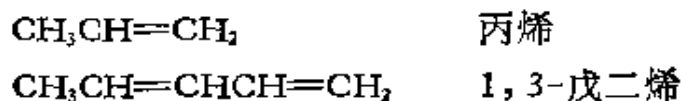
(一)饱和烃的词尾用烷,相当于英文名称词尾-ane。

例:



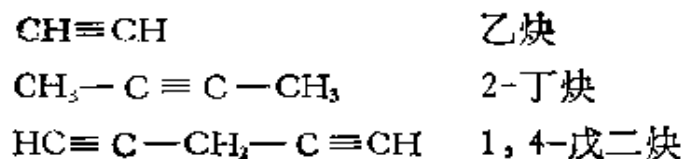
(二)含有碳碳双键的烃,用烯作为词尾,相当于英文名称词尾-ene。双键不止一个时,其数目用基数词二、三、四……等表示,词尾则为几烯。

例:

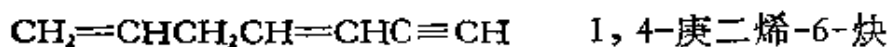


(三)含有碳碳三键的烃,词尾用炔,相当于英文名称词尾-yne。叁键不止一个时,其数目用基数词二、三、四……等表示,词尾则为几炔。

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。



不管炔键在主链上的位次如何，炔总是放在名称的最后。

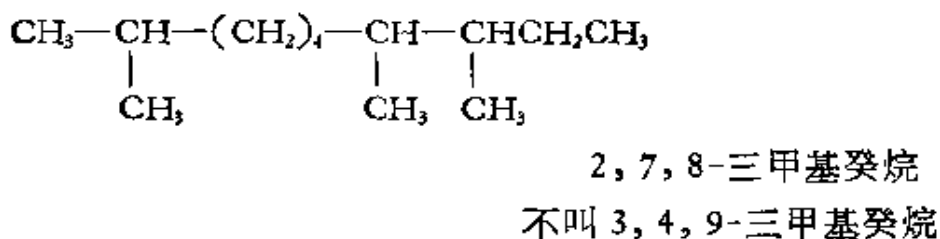
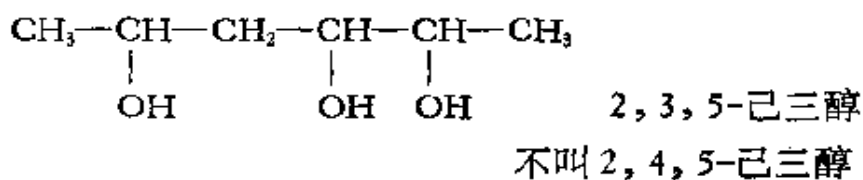
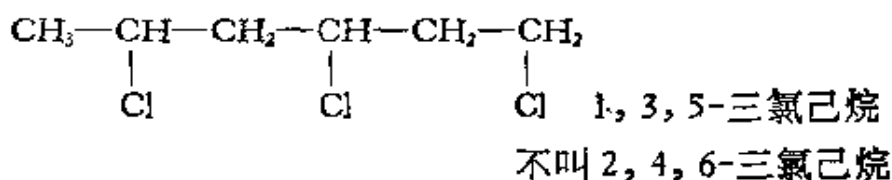
2.13 碳链的编号

(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。

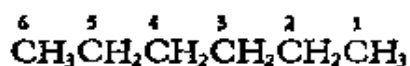
所谓“最低系列”指的是碳链以不同方向编号，得到两种或两种以上的不同编号的系列，则顺次逐项比较各系列的不同位次，最先遇到的位次最小者，定为“最低系列”。

例：



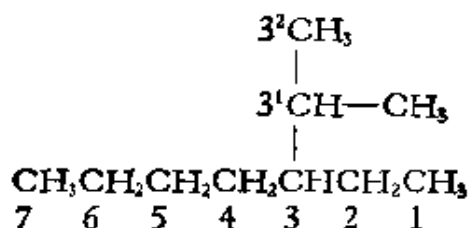
(二) 链烃的位次编号：

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。

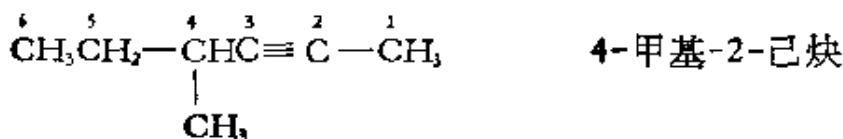
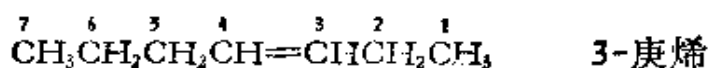
支链从和主链啣接的地方起编号,可以用带撇数字编号,也可以顺次用 n^1, n^2, n^3 等来编 (n 为啣接处主链碳原子的编号),读成 n 附 1 位, n 附 2 位, n 附 3 位等等。



(三)双、叁键的编号:

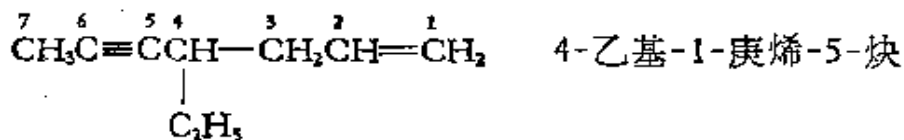
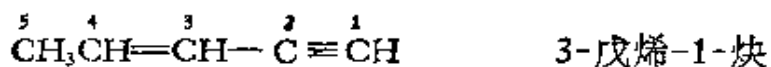
(1) 只含有一个双键或叁键的不饱和烃编号,将尽可能低的数字编给双键或叁键。

例:



(2) 同时含有双、叁键的不饱和直链无环烃,键的编号循最低系列原则给双、叁键以尽可能低的数字,一般不考虑双、叁键所在的位次大小,所以有时炔的编号低于烯。

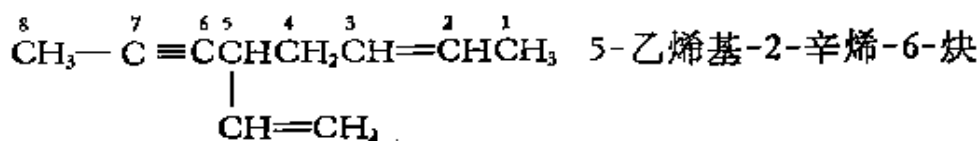
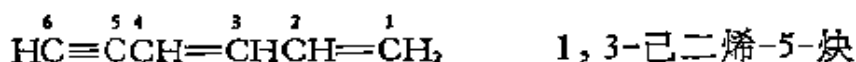
例:



但当双、叁键处在相同的位次,即编号尚有选择时,则给双键以最低编号。

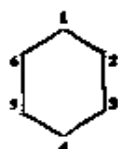
例:



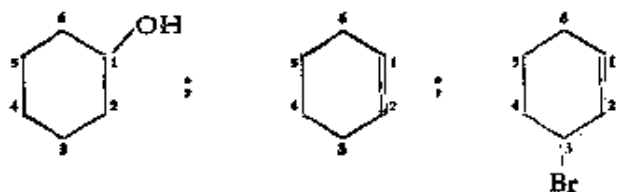


(四) 对称简单碳环的编号

结构对称的单环烃, 其位次可以从任何一个碳原子算起, 按顺时针编号。

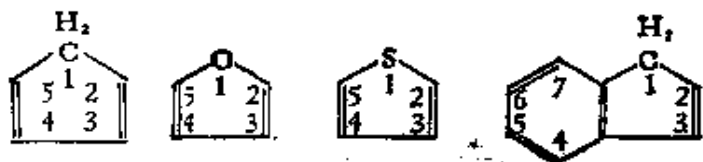


被取代的简单碳环的编号, 按编号总则精神, 从被取代的碳原子起始。

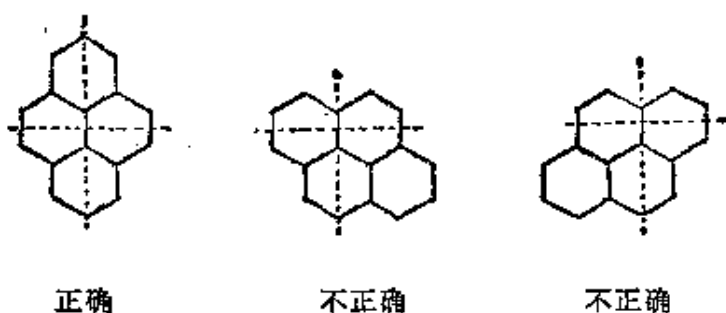


(五) 结构不对称的单环烃和一般稠环烃

结构不对称的单环烃和一般稠环烃均采用固定的编号法, 其所衍生的杂环也沿用这种固定的编号。

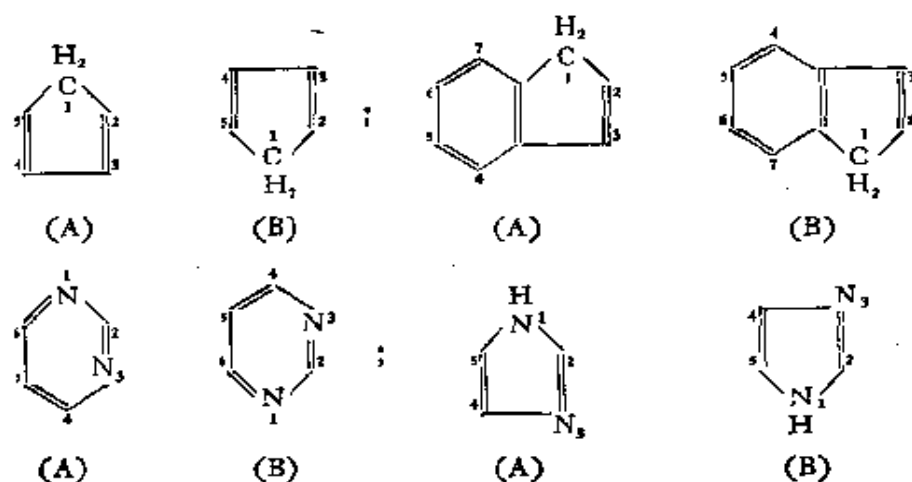


【注】按规定, 一般单边互稠环结构式的画法是: (1) 将尽可能多的环列在一横排上。(2) 将尽可能多的环列在右上象限。若有两种或多种画法符合上述要求, 则选择左下象限环数最少的一个画法。



此时，编号就自右上角第一个环最右方的一个自由角开始按顺时针方向进行。当然在可能的情况下，还要尽量给予杂原子和额外氢所在原子以最小的编号。（见第 5 章）

单环和单边相稠的双环最好也按上述规定的逻辑画结构式（见例 A）并以右上角为第一位，按顺时针的方向进行编号。有时由于采用了不同的习惯画法（见例 B），因而编号的方向就相反。不过，这只是画法不同，实际上编号是一样的。



2.2 链 烃

2.21 直链烃

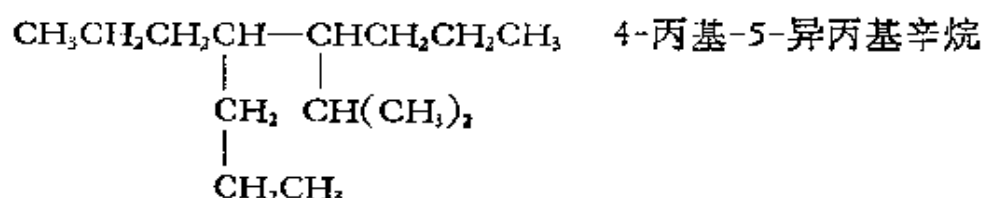
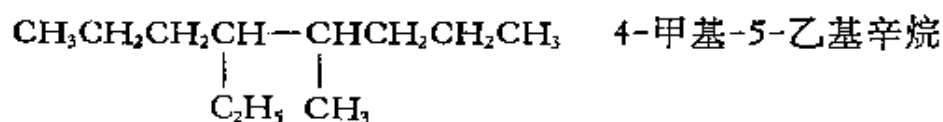
直链烃命名是在表示碳原子数目的基数词后面缀上其相当的词尾来命名（见 2.1 节）。

2.22 支链烃

（一）支链烃视为直链烃的衍生物。一般是将结构式中最长的直链作为主链，把它的名称作为主体名，再注上支链或取代基名称

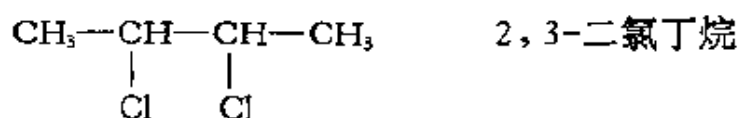
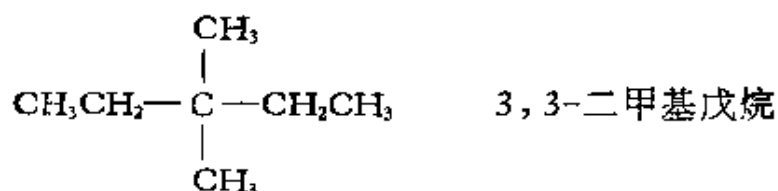
及其所在主链的位次作为词头来命名。

例:

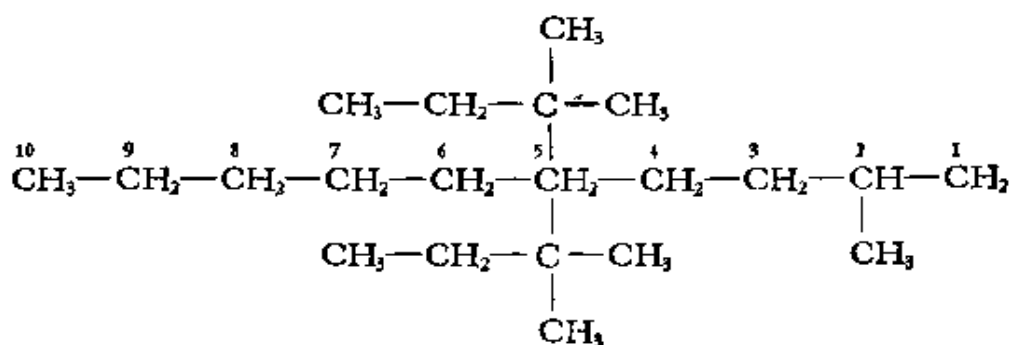


(二)相同的支链或取代基,用相同合并的原则,以相应的倍数(即基数)词二、三、四等来表示。

例:



(三)被取代了的支链,它们的全名可放在括号中或用带撇的数字来标明侧链中的碳原子等两种表示形式。

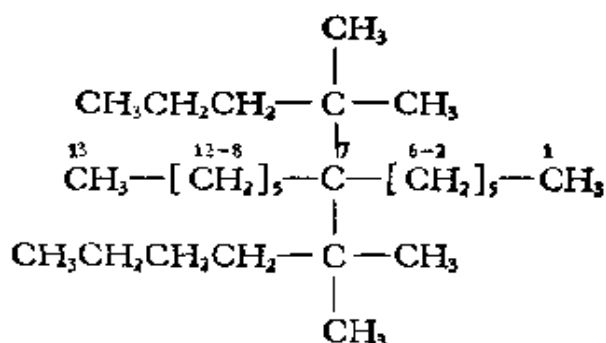


(1) 用括号而不用带撇的数字:

2-甲基-5, 5-二(1, 1-二甲基丙基)癸烷

(2) 用带撇的数字

2-甲基-5, 5-二-1', 1''-二甲基丙基癸烷



(1) 用括号而不带撇的数字

7-(1, 1-二甲基丁基)-7-(1, 1-二甲基戊基)十三烷

(2) 用带撇的数字

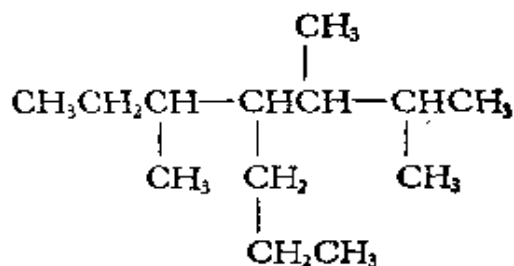
7-1', 1'-二甲基丁基-7-1'', 1''-二甲基戊基十三烷

2.23 主链的择定

(一)一般的饱和支链无环烃,若没有选择余地时,均应以最长的作为主链。

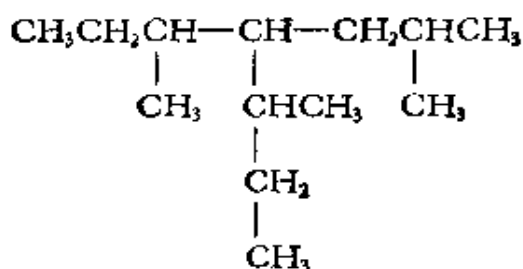
(二)当一个饱和支链无环烃具有相同长度的链可作为主链时,则选择的顺序为:

(1) 具有侧链数目最多的链。



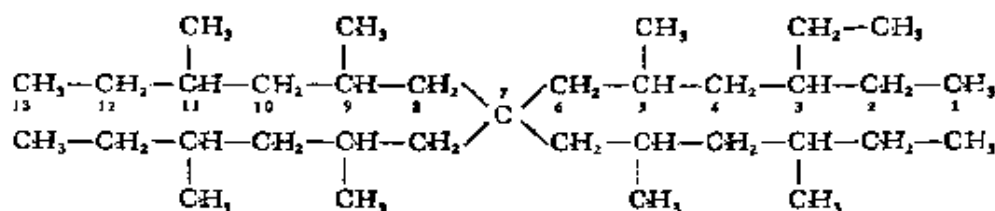
2, 3, 5-三甲基-4-丙基庚烷

(2) 侧链具有最低位次的链。



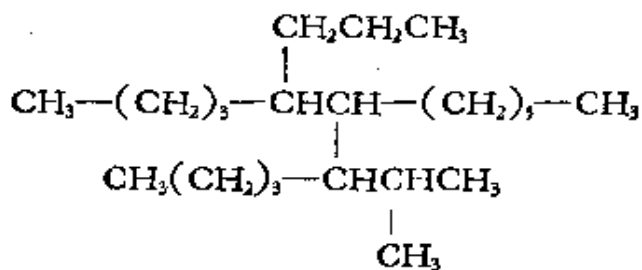
2, 5-二甲基-4-(1-甲基丙基)庚烷

(3) 在较短的侧链中,具有碳原子数目最多的链*。



5, 9, 11-三甲基-3-乙基-7, 7-二(2, 4-二甲基己基)十三烷
 或 5, 9, 11-三甲基-3-乙基-7-2', 4'-二甲基己基-7-2'', 4''-二甲基己基十三烷

(4) 具有侧分支最少的链。

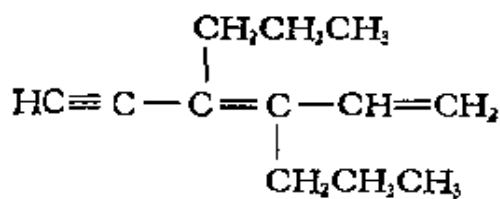


5-丙基-6-(1-异丙基戊基)十二烷

(三) 不饱和链烃的主链, 应选择含有双、叁键最多而链又尽可能最长者; 若含有两个或更多的侧链, 可作为不饱和键含量最多的链进行选择时, 则依下列标准顺次选择:

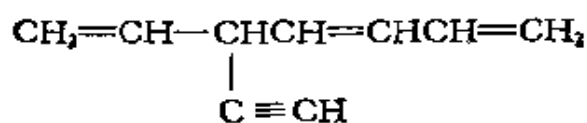
- (1) 碳原子数目最多者。
- (2) 若碳原子数目相同, 则选择双键数目最多者。

例:

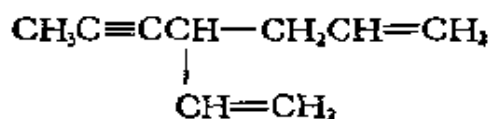


3, 4-二丙基-1, 3-己二烯-5-炔

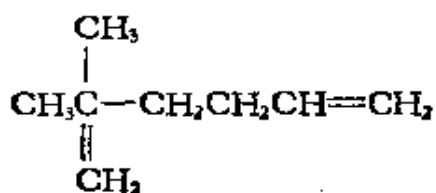
* 下面的例子中有两条可供选择的等长主链, 两者都在相同的位置上具有六个侧链, 这就要比较两种选择方法中, 按逐渐增加的顺序排列的各侧链碳原子数, 第一种选择为 1, 1, 1, 2, 8, 8。第二种选择为 1, 1, 1, 1, 8, 9。根据“较短的侧链中, 具有碳原子数目最多的链”的规定, 当逐项比较时, 对最先遇到的大小不同的侧链, 应择其较大的侧链。例中两种选择的第四项即 2 大于 1, 故选用第一种。



5-乙炔基-1, 3, 6-庚三烯



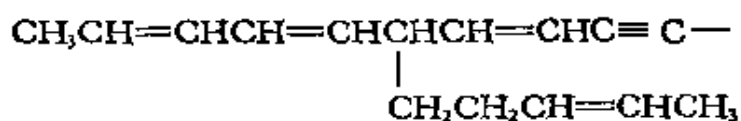
4-乙烯基-1-庚烯-5-炔



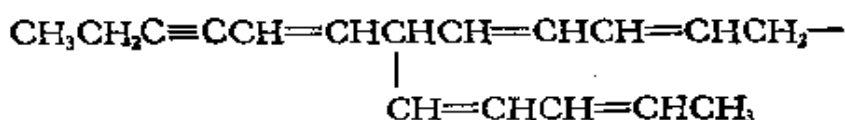
2, 2-二甲基-1, 5-己二烯

(四)若一个基的主链有选择余地时,则顺次选择有(1)双、叁键数目最多者;(2)碳原子数目最多者;(3)双键数目最多者。

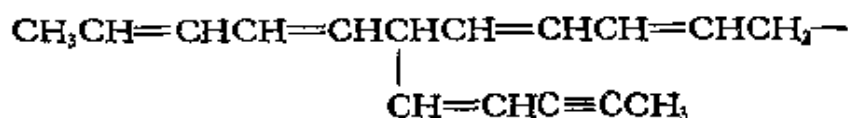
例:



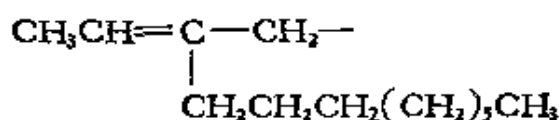
5-(3-戊烯基)-3, 6, 8-癸三烯-1-炔基



6-(1, 3-戊二烯基)2, 4, 7-十二碳三烯-9-炔基



6-(1-戊烯-3-炔基)-2, 4, 7, 9-十一碳四烯基



2-壬基-2-丁烯基

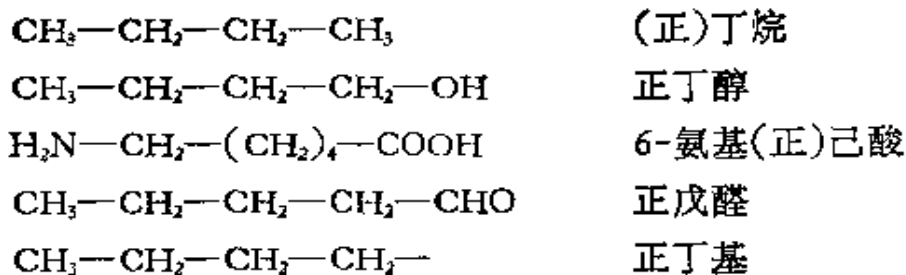
2.24 表示链异构的形容词

表示链异构的形容词计有: 正、异、新、伯、仲、叔、季七个

字。

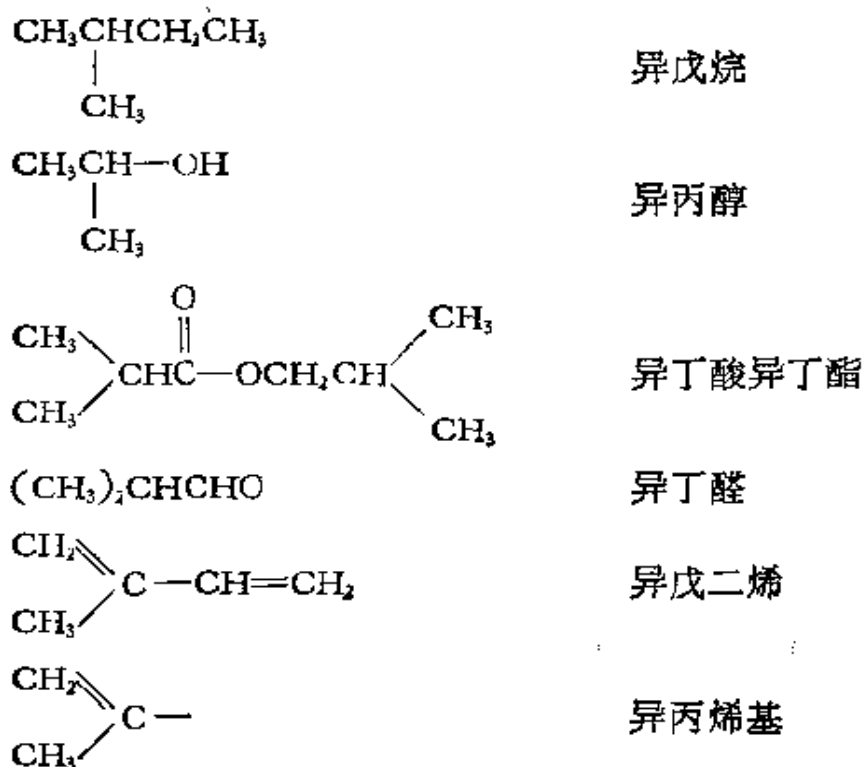
[正]: 直链烃以及官能团位于直链烃末端的化合物都用正字。在不会误解时,常予省略。

例:



[异]: 直链结构一末端带有两个甲基的特定结构,命名为异某烃或异××。

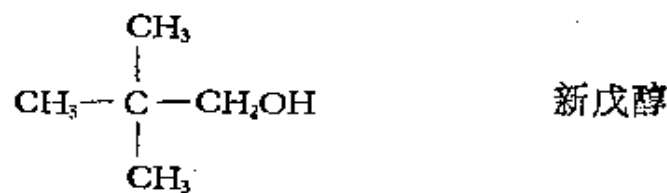
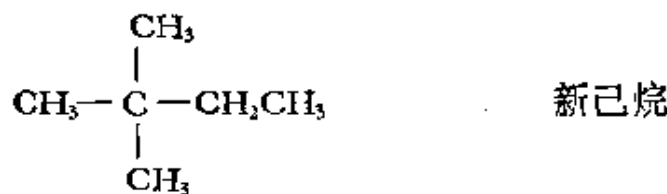
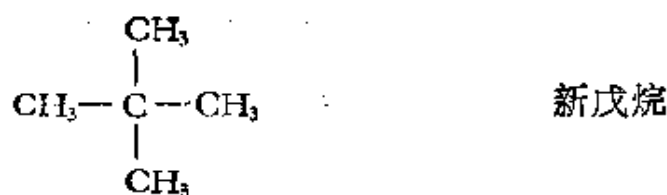
例:



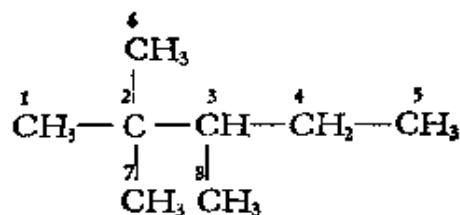
其中异戊二烯及异丙烯基为例外,只限于未被取代的情况下使用。

[新]: 专指具有叔丁基结构的五、六碳原子的链烃化合物。

例:



【伯】、【仲】、【叔】、【季】以及与其相对应的一级、二级、三级和四级是表示链异构或碳原子不同取代程度的形容词。



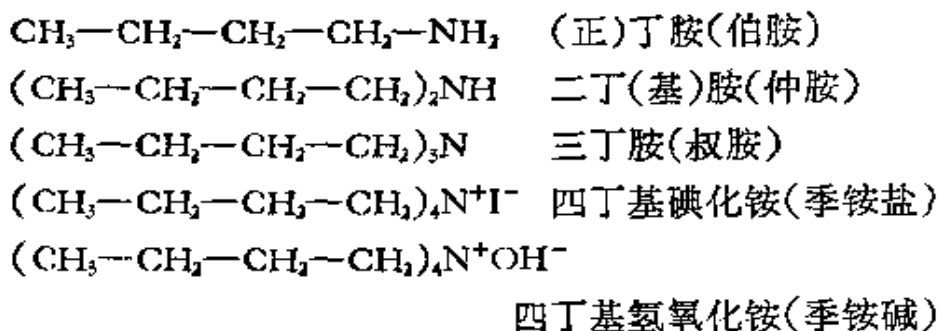
其中 C₁、C₅、C₆、C₇、C₈ 为伯碳原子（或一级碳原子）；C₄ 为仲碳原子（或二级碳原子）；C₃ 为叔碳原子（或三级碳原子）；C₂ 为季碳原子（或四级碳原子）。由不同级别碳原子所衍生的醇、胺和卤化物等，它们的级别与原碳原子相同。

例：



[伯]、[仲]、[叔]、[季]用来形容氮原子的不同程度的取代。一般均用在各胺类化合物的总称上。

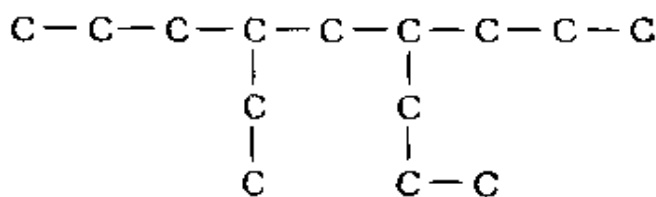
例:



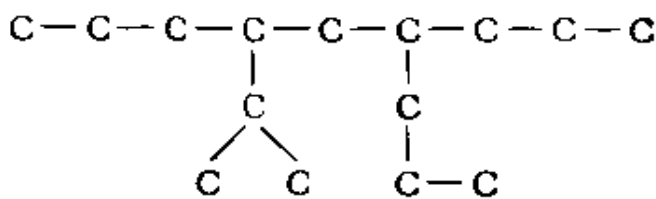
2.25 支链和取代基列出顺序

当分子结构中有几条支链或同时存在两个以上的取代基时,则在名称中支链或取代基按立体化学中次序规则(见 6.1 节)顺序列出,指定“较优”基团后列出。

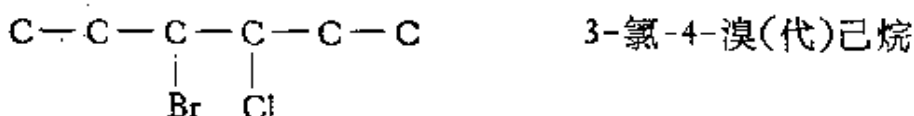
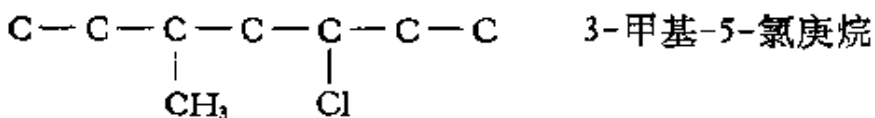
例:



4-乙基-6-丙基壬烷



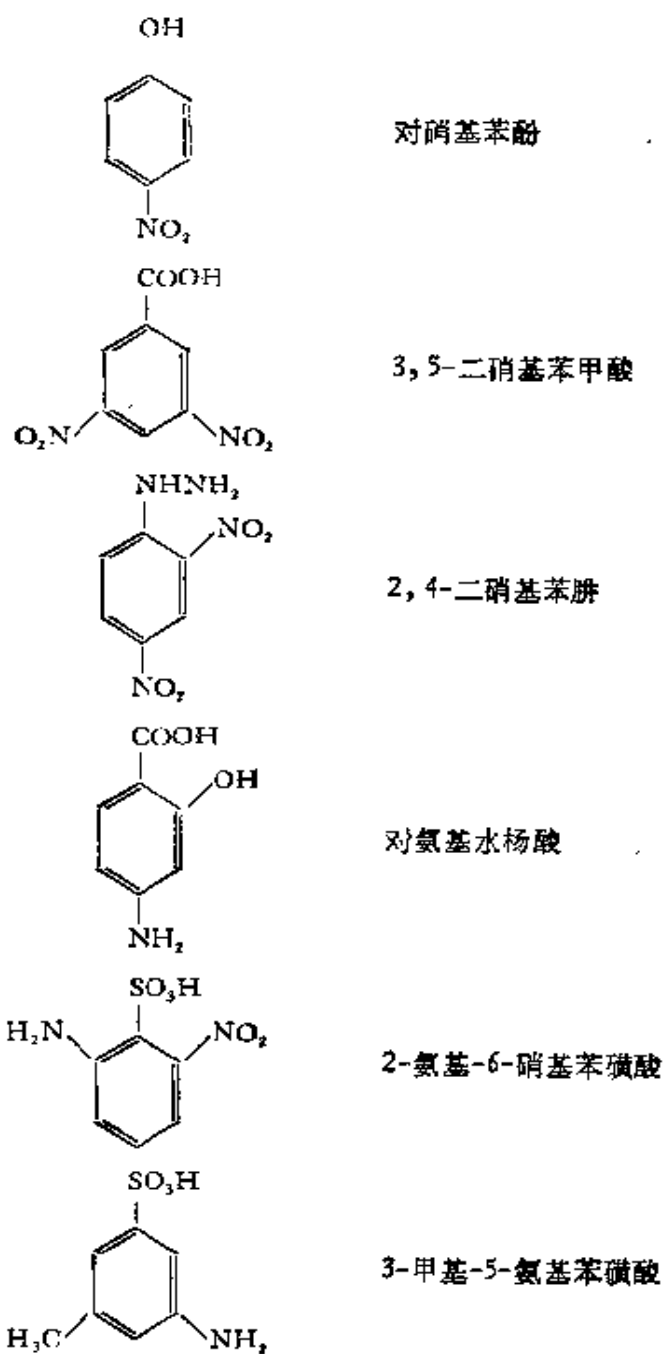
4-丙基-6-异丙基壬烷



多元取代芳香族化合物按习惯,选择母体(使其编号最小)来命名,环上取代基的列出次序其原则与链烃相同,即也遵循编号数

字小和“次序规则”等。

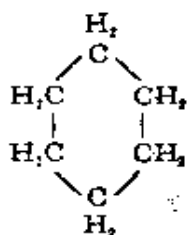
例：



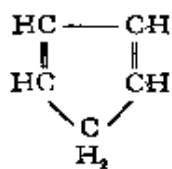
2.3 脂 环 烃

简单的脂环烃母核名称一般在其相应的链烃名称的前面加上词头“环”字构成。

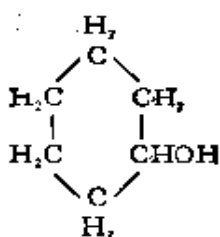
例:



环己烷



环戊二烯



环己醇

2.4 芳香烃

2.41 芳香烃的特定名称

重要的芳香烃母核以音译西文名, 给予特定名称。

常见单环芳香烃母核环己三烯的特定名称为苯。

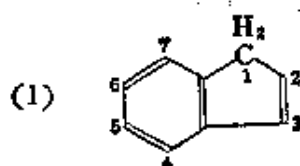


或



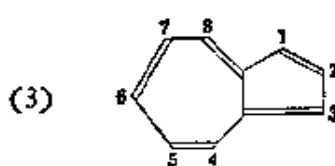
苯 (benzene)

常见的多环芳香烃母核的特定名称有:



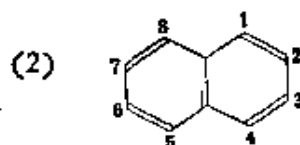
茚

(indene)



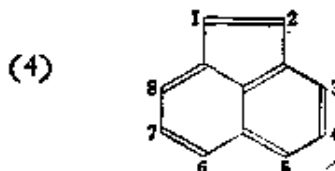
薹

(azulene)



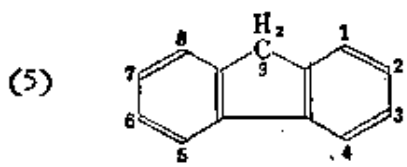
萘

(naphthalene)

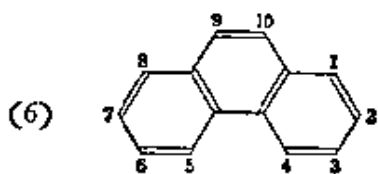


苊

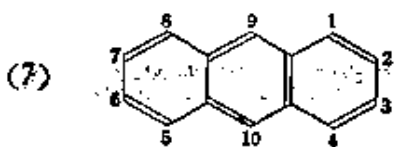
(acenaphthylene)



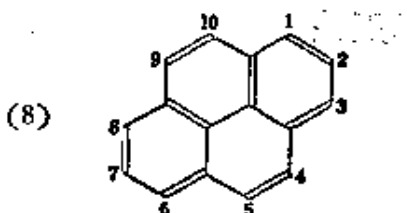
芴
(fluorene)



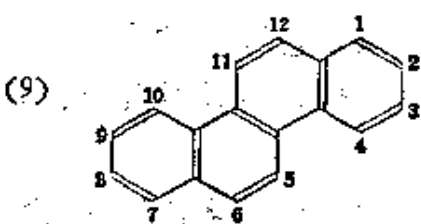
菲
(phenanthrene)



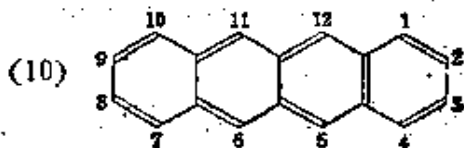
蒽 (anthracene)



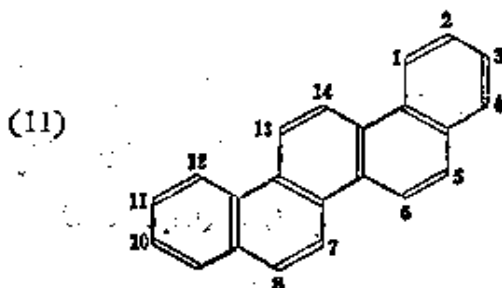
芘
(pyrene)



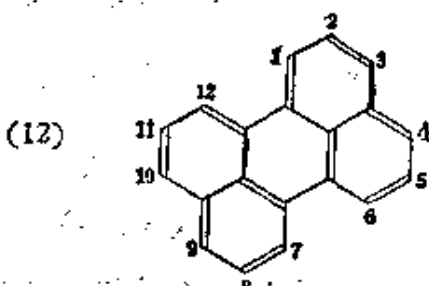
蒽 (chrysene)



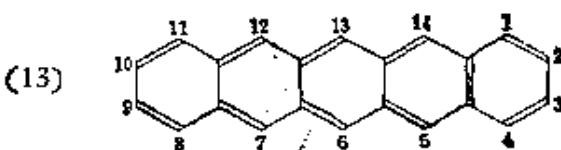
并四苯 (naphthacene)



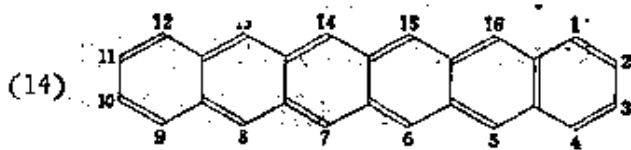
苈 (picene)



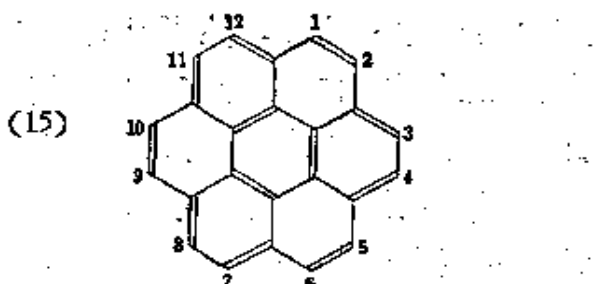
芘
(perylene)



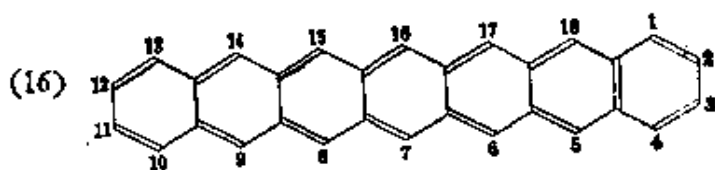
并五苯
(pentacene)



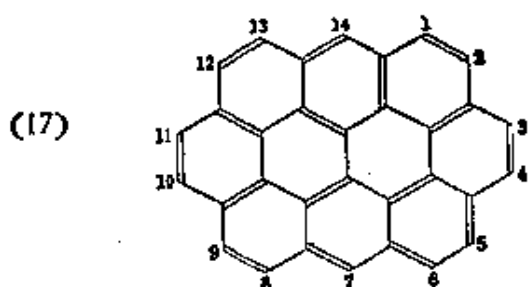
并六苯 (hexacene)



蔻 (coronene)



并七苯 (heptacene)



卵苯 (ovalene)

此外,环戊二烯负离子和环庚三烯正离子可俗称为茂和萘。



Fe

二茂铁



Br⁻

溴化萘

2.42 稠环烃

(一)直线式稠环,几个苯环通过两位或多位互相结合成一横排线状的苯稠环,除萘、蒽用特定名称外,一般命名为并几苯(见1.2节介词“并”)。

(二)非直线式稠环:即为几个苯环通过两位或多位互相结合,成为角式的苯稠环,除了已有的特定名称者外(见2.41节),均用含有最多环数的、有特定名称的环或直线式稠环作为母体环,其余部分称为取代部分,作为取代部分应尽可能简单。

(1)稠边位置的表示方法:母体部分和取代部分确定以后,各环的稠合位置(即公用边)需表示清楚,方法是:

① 母体各边按原环系编号的顺序,将各边标以 a, b, c, \dots 。

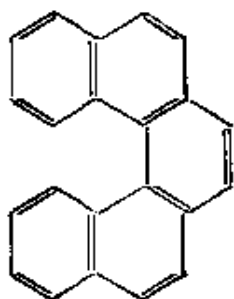
② 取代部分根据原环系正常编号顺序，将各原子标以 1, 2, 3……。若取代部分是纯碳环，应使稠边编号最小。

③ 命名时，将取代部分的数字列在前，母体部分字母列于后，数字和字母之间用“-”半字线相连，并用 [] 括上，置于取代名称和母体名称之间。

④ 稠合处的数字顺序，按母体定位字母顺序为准，方向相同时数字从小到大；相反时，则数字从大到小。

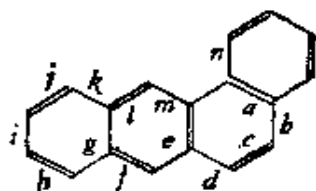
⑤ 稠合以后环系另行编号。

例：

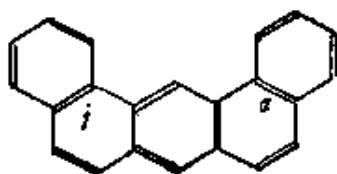


二苯并菲

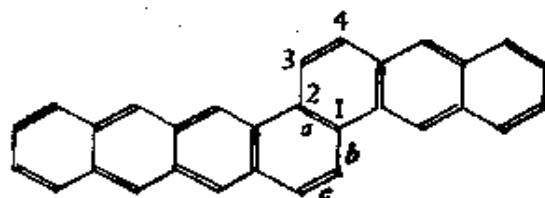
(不叫萘并菲，因为虽然萘并环只有一个，而苯并环有两个，但苯并比萘并简单)



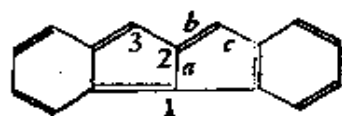
苯并 [a] 蒽



二苯并 [a, i] 蒽



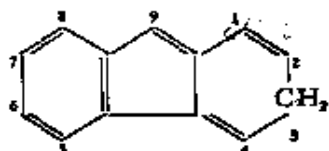
蒽并 [2, 1-a] 并四苯



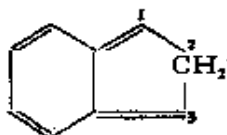
菲并 [1, 2-a] 菲

(2) 额外氢的标明方法: 当两个或两个以上具有最大数目非累积双键的异构稠合母环可使用同一名称, 而此名称又可以用标出一个或数个氢原子(即额外氢)在式中所占位置的方法予以肯定时, 则可以在名称中注上一个位码, 位码后附上斜体大写 *H* 来标明额外氢, 从而命名各异构体。

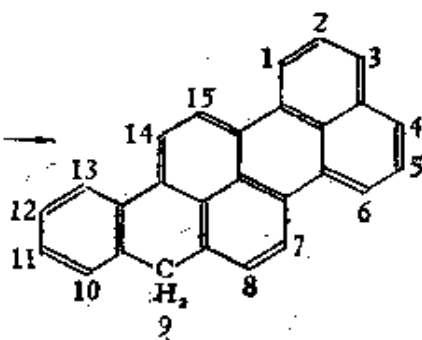
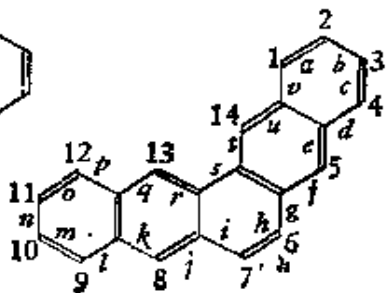
例:



3*H*-茚



2*H*-茚

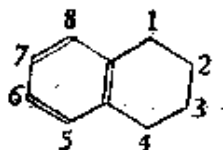


9*H*-二苯并[*de, rst*]茚芬

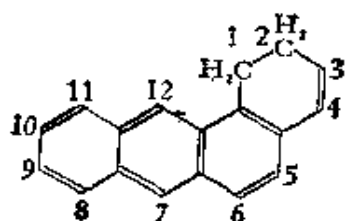
(三) 稠环烃加氢化合物的命名:

(1) 部分不是芳香烃的稠环烃, 可以看作是芳香环烃的加氢物来命名, 并在名称前面标出氢化的位次, 必要时标记出几氢化, 即若干氢化某芳烃。

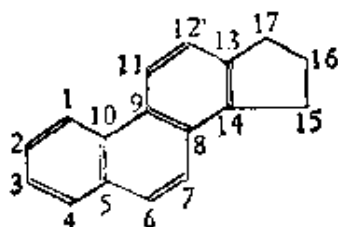
例:



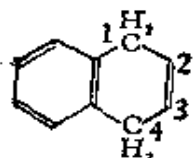
1, 2, 3, 4-四氢(化)茚



1,2-二氢(化)苯并[a]蒽

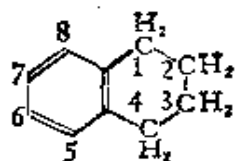


16,17-二氢(化)-15-*H*-环戊二烯并[a]菲

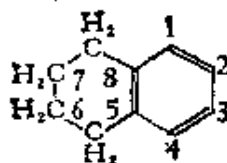


1,4-二氢化喹

当有选择余地时,则将加氢碳原子给以尽可能低的编号。

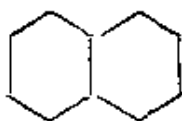


正确



不正确

(2) 完全饱和的稠环烃,命名方法与部分饱和稠环烃相同。即当芳香母核已有特定名称,就可以在芳香母核名称前若干“氢化”而完成命名。

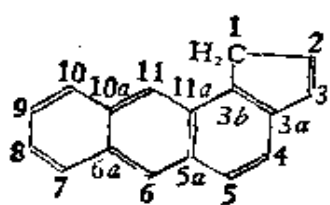


十氢化萘

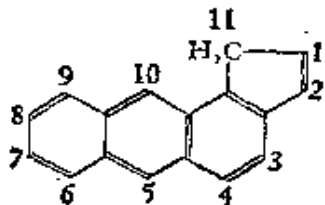
(四)稠环烃的编号:

(1) 结构不对称的单环烃和有特定名称的稠环烃均采用固定编号法(见 2.41 节),它们衍生的杂环,也沿用固定的编号法。

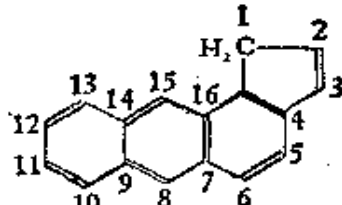
编号一般自右上方第一个环最上方的自由角开始,按顺时针方向进行。在可能情况下,需尽量给予杂原子和额外氢以最小的编号;此外,稠边原子不编入内。



正确

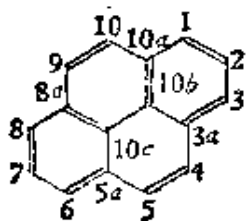


不正确

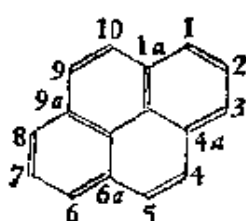


不正确

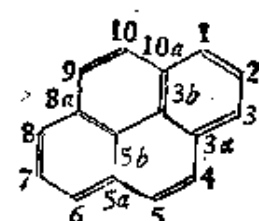
(2) 稠环上碳原子的编号：对于稠环上的非共用碳原子的编号，按顺时针顺序选择紧随前一碳原子的位次；而稠边上共用碳原子的编号，则按顺时针的顺序，取紧挨着前面的最高位次为它的位次，并分别用 *a*、*b* 标示。



正确



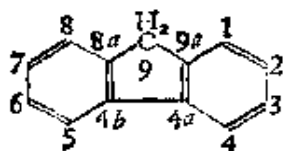
不正确



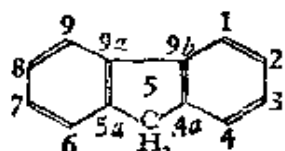
不正确

稠边碳原子的编号，也同样要遵循最低系列编号的原则。

例：

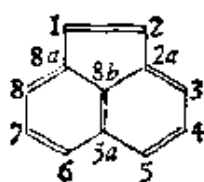


正确

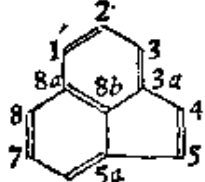


不正确

编号
4, 4, 8, 9 小于 4, 5, 9, 9



正确



不正确

编号
2, 5, 8, 8 小于 3, 5, 8, 8

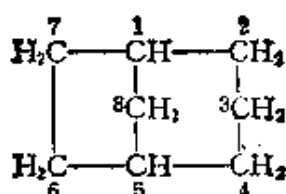
2.5 桥 烃

2.51 简单的桥环

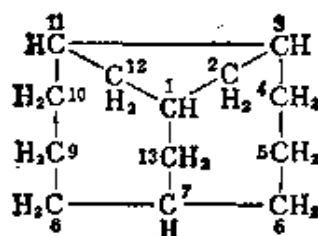
简单的桥环可用二环、三环等做词头，然后在方括号中注上各

桥所含碳原子数,放在相当于环中全体碳原子数的链烃名称之前。方括号中碳原子数按由多到少的次序列出。方括号内数字用下角圆点隔开表示原子数目。

例:



二环 [3.2.1] 辛烷



三环 [5.5.1.0^{3,11}] 十三烷

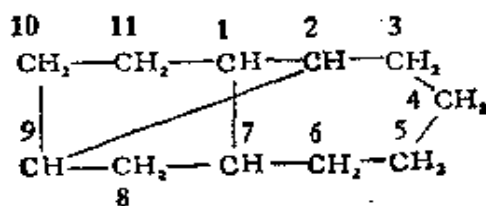
后一化合物命名中,0 的指数 3, 11 用逗点隔开,表示为无原子的键桥(叫做键桥,以区别于原子桥)在整个环编号中桥接的位次。

比较简单的桥环,也可以用“亚某基环某烷”的方法予以命名。如上例中“二环 [3.2.1] 辛烷”也可命名为 1, 5-亚甲基环庚烷。

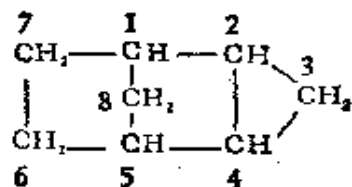
2.52 桥环的编号

桥环的编号原则:自桥的一端开始,循最长的环节编到桥的另一端,然后再循余下的最长的环节编回到起始桥端。以此类推。

例:



三环 [5.4.0.0^{2,9}] 十一烷



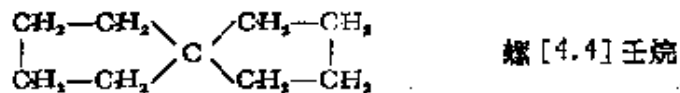
三环 [3.2.1.0^{2,4}] 辛烷

2.6 螺 烃

2.61 简单的螺环

螺环的命名法,是根据整个环中所含的螺原子数目而用螺、二

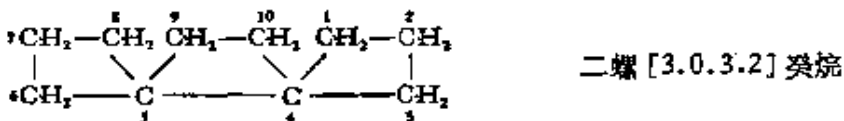
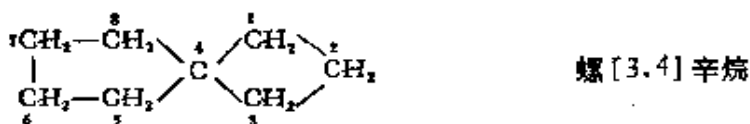
螺、三螺等词头,然后在方括号中顺着整个环的编号次序用数字标明各螺原子间所夹的碳原子数目,加在相当于整个环的链烃名前,数字之间用下角圆点隔开。



螺环烃的编号方法:

单螺环从邻接于螺原子的一个碳原子开始,由小环编到大环。
多螺环从邻接于端螺原子的一个碳原子开始,由较小的端环顺次编完,并尽量给螺原子以最小的编号。

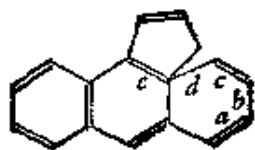
例:



2.62 与稠环有关的简单螺环

含有螺原子的普通稠环,一般均按稠环命名法命名。

例:

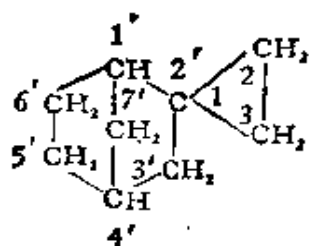


环戊烯并[4,3-*e*]-10,10 α -二氢蒽

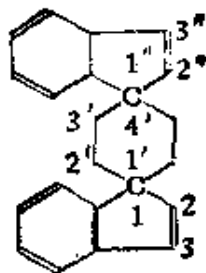
2.63 复杂的螺环

用螺、二螺等做词头,并将各组分环名用方括号括上置于后,在组分环名称之间用各自原有的编位号数标出螺合的位次。第一个组分环编号不加撇,第二个组分环编号加一撇,若有第三个组分环,则其编号加二撇,其它以此类推。

例:



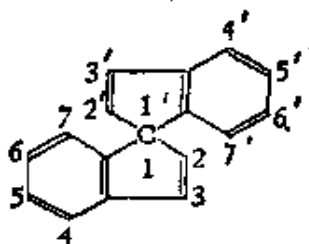
螺[环丙烷-1, 2'-降莰烷]
或 螺[环丙烷-1, 2'-(1', 4' 亚甲基
环己烷)]



二螺[莰-1, 1'-环己烷-4', 1''-莰]
或 莰-1-螺-1'-环己烷-4'-螺-1''-
莰

两个相同的环所组成的单螺环用词头螺双 (spirobi) 命名。各组分环维持其原编号, 但一个加撇, 一个不加撇。

例:



1, 1'-螺双莰



螺双环己烷

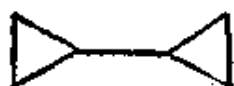
2.7 联环烃

两个或两个以上的环(单环或稠环), 彼此以双键或单键直接相连, 而且联键的总数少于所含环系的总数, 称为联环烃。

(一) 两个相同环烃组成的联环烃, 使用介词联字, 以“联二”、“联三”作为词头, 即为“联二某烃(基)”、“联三某烃(基)”等。

联环烃中诸环系, 分别保留各烃(基)的原编号。一个用带撇的数字, 则另一个用不带撇的。联接点用相应的位次标在名称前。如果编号可以选择, 则给联接点编号以较低的环系、不带撇的数字。

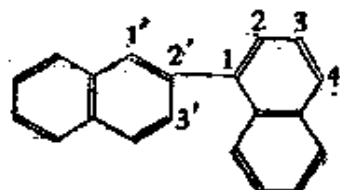
例:



1,1'-联环丙烷



联苯



1,2'-联二萘



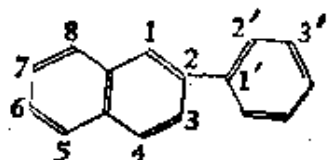
联三环丙烷

(二)两个不相同的环系联合,则应择定一个环作为基本组分(或称母核),而将其它的环系作为取代基来命名。基本组分以不带撇的数字编号,而取代基则用带撇的数字编号。

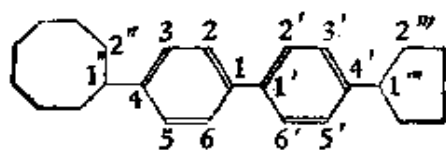
基本组分依次按下列特征选择:

(1) 所含环数较多者。

例:



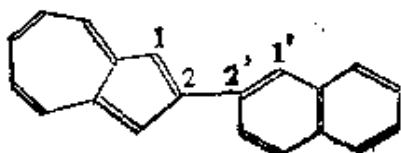
2-苯基萘



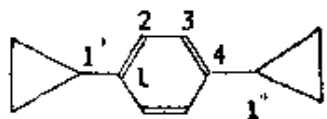
4-环辛基-4'-环戊基联苯

(2) 所含环系较大者。

例:

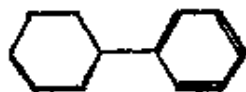


2-(2'-萘基)茚



1,4-二环丙基苯

(3) 氢化程度最低者。

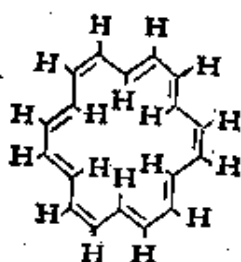


环己基苯

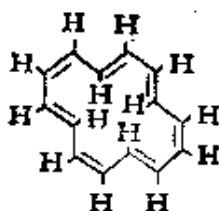
2.8 轮 烯

轮烯 (annulene) 是环状共轲的多烯烃，命名时以轮烯作为母体名，把环内碳原子总数用带方括号的阿拉伯数字标注在母体名称前。

例：



[18]轮烯



[14]轮烯

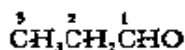
3. 官能团和取代基的位次标明法和位次符号的省略法

3.1 官能团和取代基位次的选定

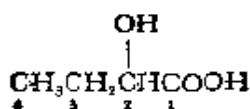
官能团和取代基在化合物中的位次指的就是母体化合物和它连接的碳原子(或杂原子)的位次。

在编号时应使官能团或取代基的位次最小。

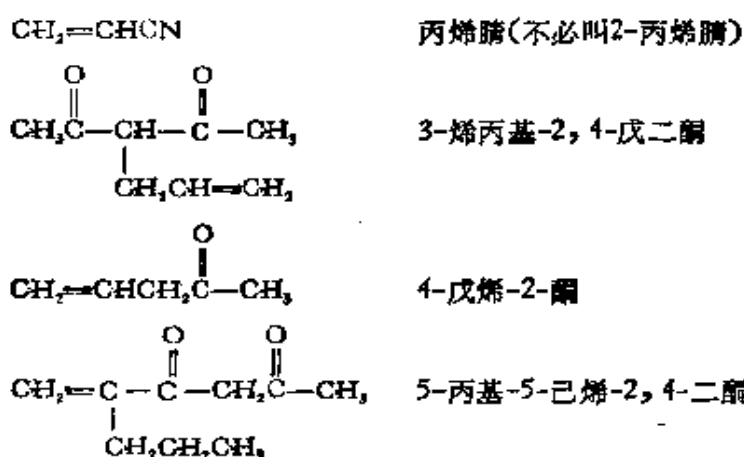
例：



1-丙醛(1-在命名中通常省略)不能叫3-丙醛

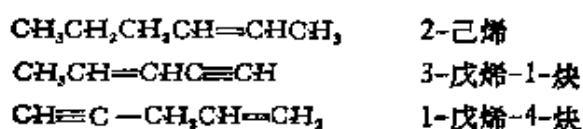


2-羟基丁酸(或 α -羟基丁酸)



双键、叁键的位次指的是键开始碳原子的位次。在编号时,应注意使双键或叁键具有最小的数目。在双、叁键同时存在的简单化合物中,当它们的位次相同时,应使双键具有最小的位次。

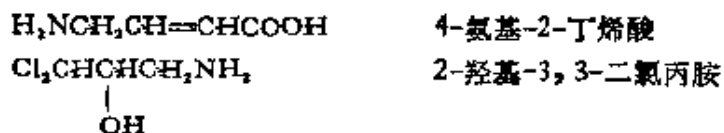
例:



3.2 用编号来标明位次

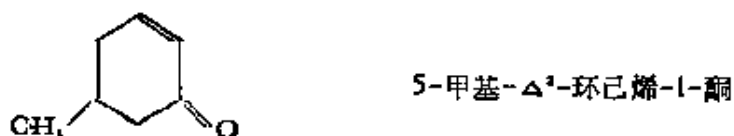
官能团和取代基的位次可以有多种标明法。用编号来标明位次是最系统的一种方法。规定将编号1,2,3,4等写在官能团(或取代基)名的前面。为了便于分辨,可将标明位次的1,2,3等读成一位,二位,三位等等。数字和名称连接处,在书写时要加上半字线。

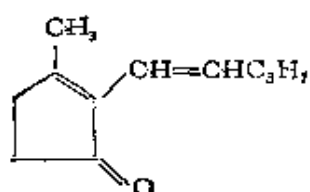
例:



在用数字编号时,还常常采用以希腊字母 Δ 来标明烯键的位次,即在 Δ 右上角标上数字。

例:





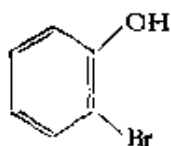
3-甲基- $\Delta^{1,1'}$ -戊烯基环戊烯酮

3.3 用希腊字母来标明位次

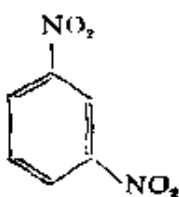
希腊字母也用来标明位次（见 1.41 节）。要注意的是用于羧酸及其衍生物和杂环时， α -位相当第 2 位， β -位相当于第 3 位， ω 则常常指端位。

在多元取代苯等化合物中，取代基的相对位置常用拉丁字头 o -(*ortho*)、 m -(*meta*) 和 p -(*para*) 分别表示邻、间、对的位次。

例：



邻(或 o -)溴苯酚



间(或 m -)二硝基苯

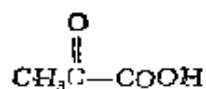


对(或 p -)甲苯胺

3.4 位次符号的省略法则

(一)当化合物只有一种可能的结构时，可省去位次符号。

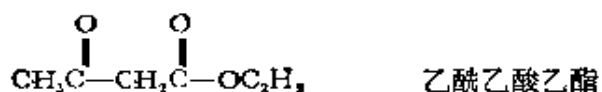
例：



丙酮酸

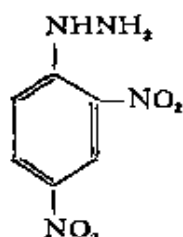


丙烯酸



(二) 1-位的省略: 1-位取代基或官能团, 作为名称词尾时, 在不致误解时, 则可以将位次编号省略。

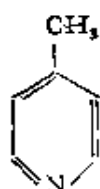
例:



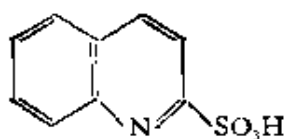
2, 4-二硝基苯肼
不必叫 2, 4-二硝基-1-苯肼

(三) 杂环衍生物中 1-和 2-位的省略: 当 1-位为杂原子时, 其 1-位位次常常可以省略; 此外, 2-位官能团若用作名称的最后一个词尾, 便可省去。

例:



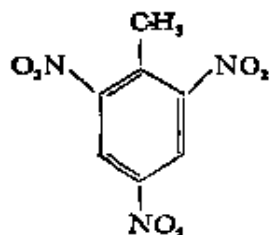
4-甲基吡啶(或 γ -甲基吡啶)



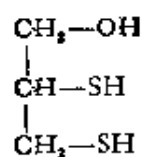
喹啉磺酸(或 2-喹啉磺酸)

(四) 最常见的异构体省略其位次符号: 几种异构体中, 最常见的一种, 通常将位次符号省略。

例:



三硝基甲苯

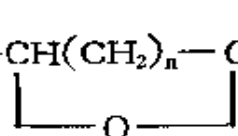
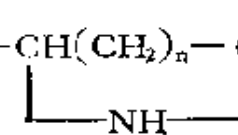


二巯基丙醇(或2,3-二巯基丙醇)

4. 官能团和取代基

4.1 官能团和取代基的命名

(一) 有机化合物分子内常见的官能团或取代基及其名称如下:

官能团或取代基	名称
$\begin{array}{c} \text{R} \quad \text{R} \\ \diagdown \quad / \\ \text{C} = \text{C} \\ / \quad \diagdown \\ \text{R} \quad \text{R} \end{array}$	烯
$\text{R—C}\equiv\text{C—R}$	炔
$\text{R—OH}(\text{Ph—OH})$	醇或酚
R—NH_2	胺
R—CHO	醛
$\text{R}_2\text{C=O}$	酮
$\text{R—SH}(\text{Ph—OH})$	硫醇或硫酚
R—COOH	羧酸
$\begin{array}{c} \text{O} \\ // \\ \text{R—C} \\ \backslash \\ \text{X} \end{array}$	酰卤
$\begin{array}{c} \text{O} \\ // \\ \text{R—C} \\ \backslash \\ \text{OR}' \end{array} \quad \left(\text{R—CH}(\text{CH}_2)_n\text{—C=O} \right)$ 	酯(内酯)
$\begin{array}{c} \text{O} \\ // \\ \text{R—C} \\ \backslash \\ \text{NH}_2 \end{array} \quad \left(\text{R—CH}(\text{CH}_2)_n\text{—C=O} \right)$ 	酰胺(内酰胺)
$\begin{array}{c} \text{O} \\ // \\ \text{R—C} \\ \backslash \\ \text{O} \\ / \\ \text{R—C} \\ // \\ \text{O} \end{array}$	酸酐

$R-O-R'$	醚
$R-S-R'$	硫醚
$\begin{array}{c} O \\ \uparrow \\ R-S-R \end{array}$	亚砷
$\begin{array}{c} O \\ \uparrow \\ R-S-R \\ \downarrow \\ O \end{array}$	砷
$R-SO_3H$	烷基磺酸
$R-SO_2-OR'$	烷基磺酸酯
$R-SO_2-NHR'$	烷基磺酰胺
$\begin{array}{c} O \\ \\ R-C-O-O-H \end{array}$	过氧酸
$R-CN$	腈
$\begin{array}{c} O \\ \\ RC-OM \text{ (M 为阳离子)} \end{array}$	羧酸盐
$R-X$	卤化物
$-NO_2$	硝基
$-NO$	亚硝基
$-N \equiv N^+X^-$	重氮盐

(二) 有机化合物分子中所含官能团和取代基,在化合物名称中都以词头和词尾两种形式出现。同一官能团或取代基,其词头、词尾的形式往往不同。列表如下:

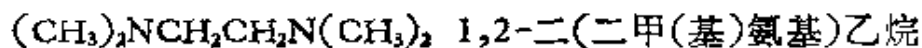
官能团或取代基	词头名称	词尾名称
$-OH$	羟基	醇、酚
$-SH$	巯基或硫羟基	硫醇

续表

官能团或取代基	词头名称	词尾名称
$-\text{NHR}$	氨基(或R—H)	胺
$-\text{CN}$	氰基	腈
$-\text{OR}$	烷氧基	醚
$-\text{SR}$	烷硫基	硫醚
$\begin{array}{c} \text{R}-\text{C}-\text{R}' \\ \\ \text{S} \end{array}$		硫酮
$\begin{array}{c} \text{O} \\ // \\ \text{R}-\text{C} \\ \backslash \end{array}$	酰基	酮
$\begin{array}{c} \text{O} \\ // \\ \text{H}-\text{C} \\ \backslash \end{array}$	甲酰基	醛

4.2 复基的命名

在有误会时,复基名称后面要加上基字,不要略去,复基的个数用二、三、四等来表示。必要时可以把复基的名称放在()内。读时复基数目,可读成两个、三个等。

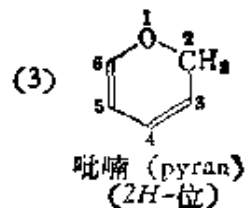
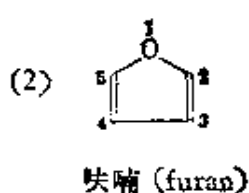
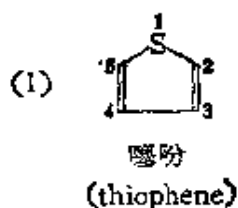


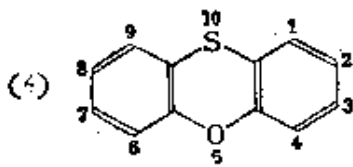
读作:一、二位两个二甲氨基乙烷

5. 杂环化合物

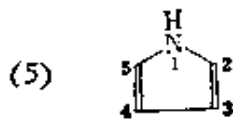
5.1 基本杂环母核的特定名称

原则上是2—3个汉字的音译,这与环烃中已通用的“苯”、“萘”、“蒽”、“菲”……的名称具有类似的普遍性,名词的结构尊重我国习惯,以“口”旁作为杂环的标志。

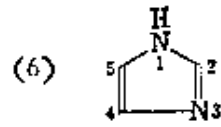




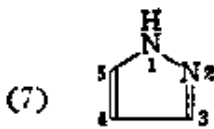
吩噻嗪
(phenoxathiin)



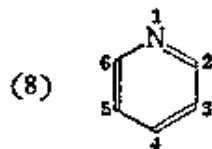
吡咯
(pyrrole)



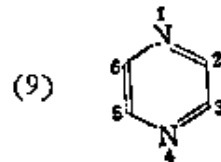
咪唑
(imidazole)



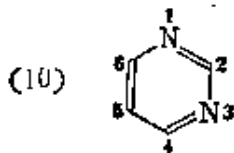
吡唑
(pyrazole)



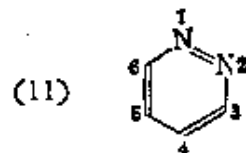
吡啶
(pyridine)



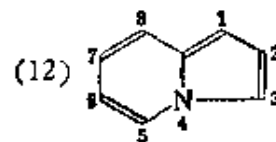
吡嗪
(pyrazine)



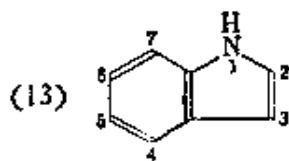
嘧啶
(pyrimidine)



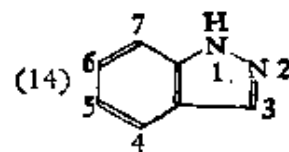
哒嗪
(pyridazine)



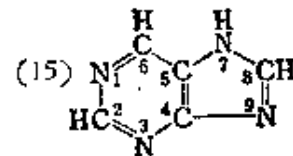
吲哚啉
(indolizine)



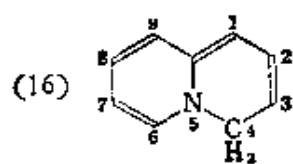
吲哚
(indole)



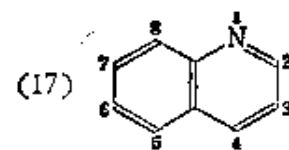
1H-吡唑
(1H-indazole)



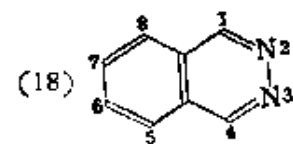
嘌呤 (purine)



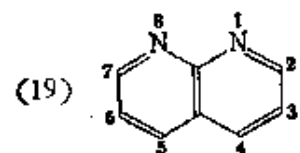
4H-喹啉
(4H-quinolizine)



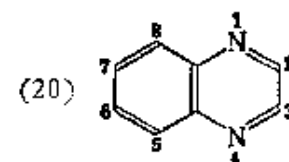
喹啉
(quinoline)



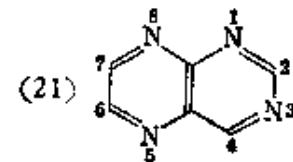
酞嗪
(phthalazine)



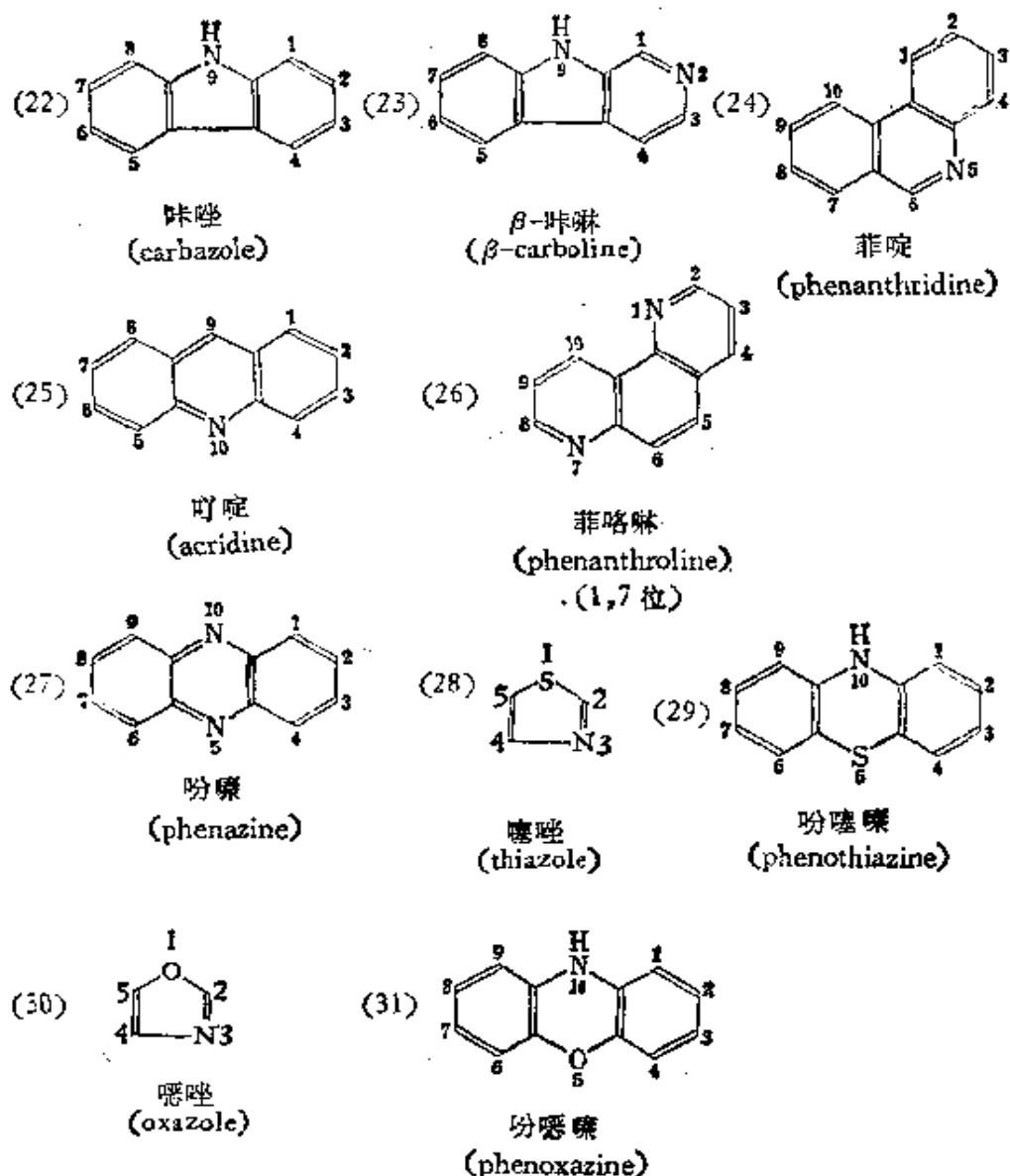
萘啶
(naphthyridine)
(1,8-位)



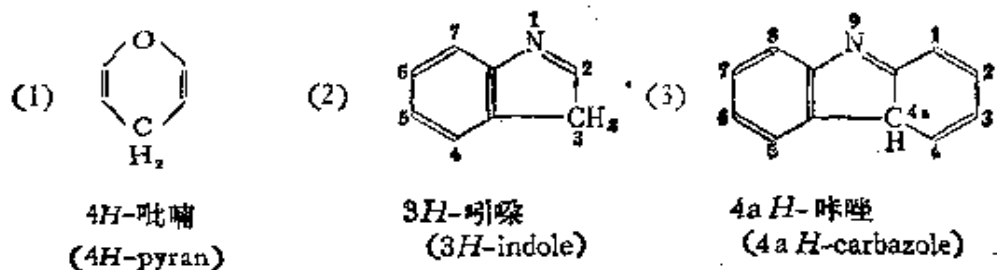
喹喔啉
(quinoxaline)



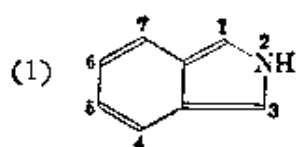
蝶啶
(pteridine)



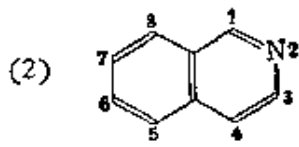
以上杂环氢的位置不相同者,把H(用大写斜体)及其位置编号放在词首,在并环上者,注明边号(用a、b、c...表示)。



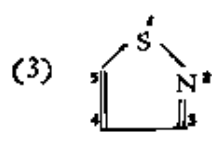
当杂原子在环上的位置不同时,可视为异构体。



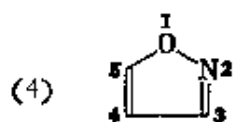
异吲哚
(iscindole)



异喹啉
(isoquinoline)



异噻唑
(isothiazole)

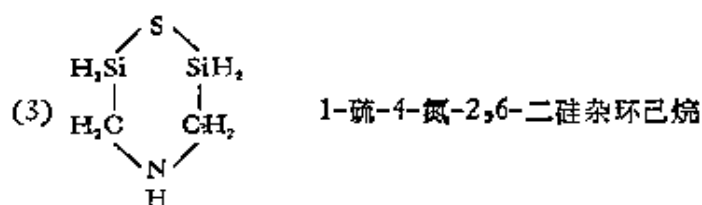
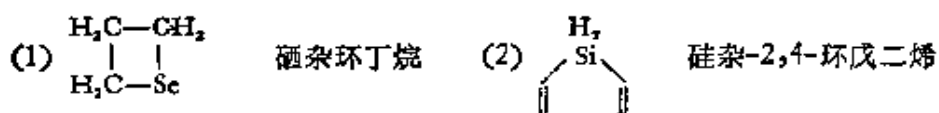


异噁唑
(isoxazole)

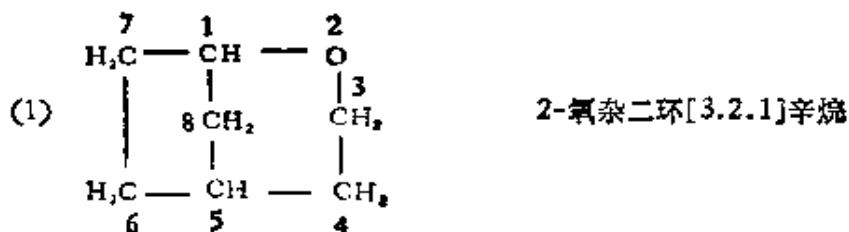
5.2 无特定名称的杂环

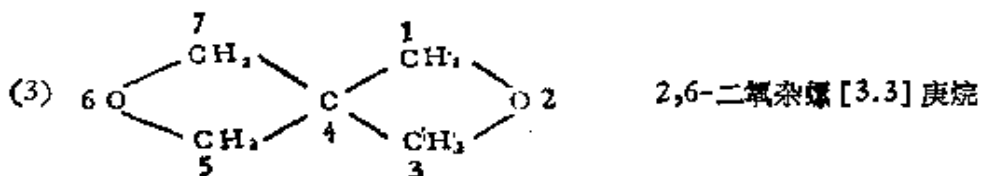
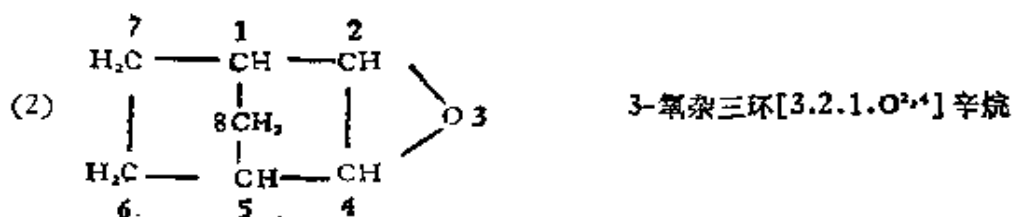
对于没有特定名称的杂环和复杂的杂环，采用“杂”字作介词，可以看作是碳环母核中碳原子被杂原子置换后的衍生物来命名。命名方法是把其相当的碳环作为母体名，在名前加上某杂(或某某杂)，并注明位次。

(一)用于单杂环时，杂原子取较低的位次，多个杂原子同时存在时，按O、S、Se、Te、N、P、As、Sb、Si、Sn、Pb、Hg的先后顺序。只有一个杂原子的杂环，名称前可不注位次。



(二)用于杂桥环和杂螺环时，母体名称前方括号内数目，按通则仅表示桥上的原子数目，中间用下角“·”圆点分开。





(三) 并联的二个环中如有一个苯环，则把“苯”字放在最前，杂环名称放在后面，中间用介词“并”字。其编号可根据习惯，不一定从杂原子开始。

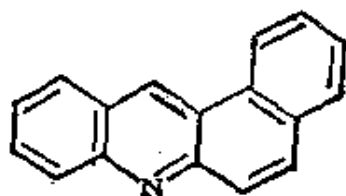


5.3 无特定名称的耦合杂环

一些耦合杂环无特定名称者，可以选择所含有特定名称的杂环作为母体基本环，并按其衍生物命名。名称中[]内编号对被并的母环用 a、b… 边号，对并环则用其自身的阿拉伯数目号码，或不用编号，如苯。

确定基本环的原则如下：

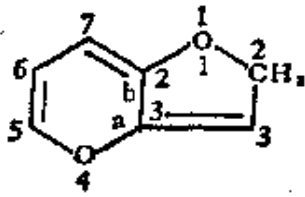
(一) 苯环与杂环并合时，含环数最多，有特定名称的杂环为基本环。



不叫苯并咪唑，而叫作苯并[α]吡啶

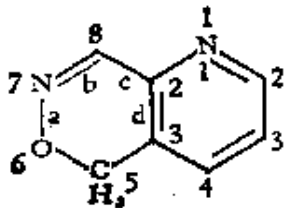
* 名称中[3]在这里仅指整环中氧的位置而不是指并联的位置。

(二) 所含的环比较大的组分。



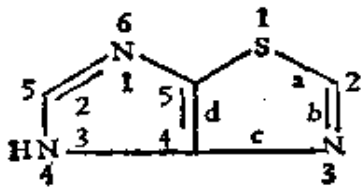
不叫 2H-吡喃并 [3,2-*b*] 咪喃，
而叫作 2H-咪喃并 [3,2-*b*] 吡喃*
(*括号内 3, 2 是指顺咪喃环边号方向，
a, b... 属于吡喃环上的编号)

(三) 含杂原子数最多的组分。



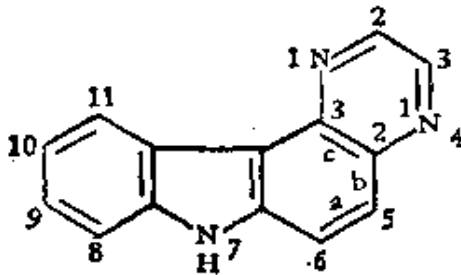
不叫邻噁嘧并 [4,5-*b*] 吡啶，而叫作
5H-吡啶并 [2,3-*d*] 邻噁嘧

(四) 含杂原子种数最多的组分。



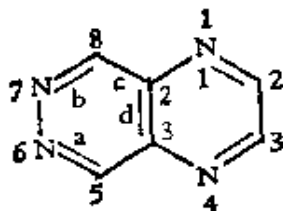
不叫 4H-噻唑并 [4,5-*d*] 咪唑，而叫作
4H-咪唑并 [4,5-*d*] 噻唑

(五) 含环数目最多的组分。



不叫 7H-喹啉并 [3,2-*f*] 喹啉
而叫作 7H-吡啶并 [2,3-*c*] 喹啉

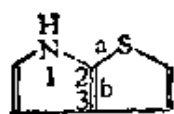
(六) 含相同数目的同种杂原子并有同样大小环时，则把稠合前杂原子编号较低者作为基本环。



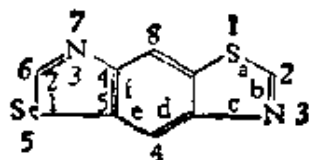
不叫吡啶并 [4,5-*b*] 吡啶而叫作吡啶
并 [2,3-*d*] 吡啶

(七) 当杂原子不止一种时，按 O、S、Se、Te、N、P、As、Sb、Si

…顺序,选先行列出的杂原子含量最多的组分。

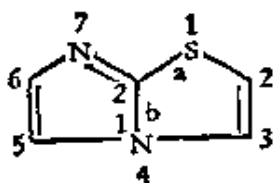


不叫噻吩并[2,3-*b*]吡咯而叫作吡咯并[2,3-*b*]噻吩



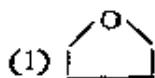
不叫噻唑并[5,4-*f*]苯并噻唑而叫作噻唑并[5,4-*f*]苯并噻唑

如果有一个杂原子占据了一个稠合位置,则稠合的两个组分环都应当视作含有该杂原子来命名。

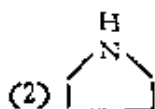


咪唑并[2,1-*b*]噻唑

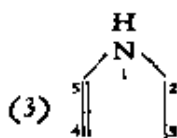
对含氢的杂环可用中文数字标明其数目,用阿拉伯数字标明其位置,全氢化物可只标明数目。其名称可按特定名称衍生物命名方法,或用音译,两种平行使用。其中含氮五元环也可在特定名后加“烷”字来命名。



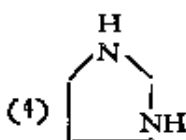
四氢呋喃



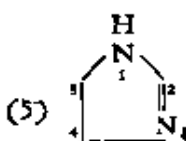
四氢吡咯或吡咯烷



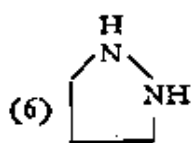
2,3-二氢吡咯或4-吡咯啉



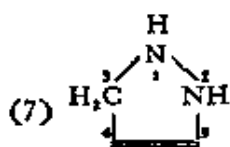
四氢咪唑或咪唑烷



4,5-二氢咪唑或2-咪唑啉



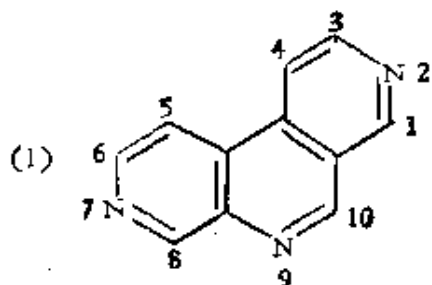
四氢吡啶或吡啶烷



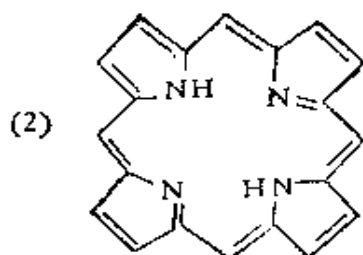
1,3-二氢吡啶或3-吡啶啉

5.4 使用较少而已见诸文献的杂环

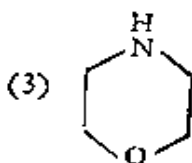
(一) 某些并联杂环,可以采用“杂”字命名或俗名。



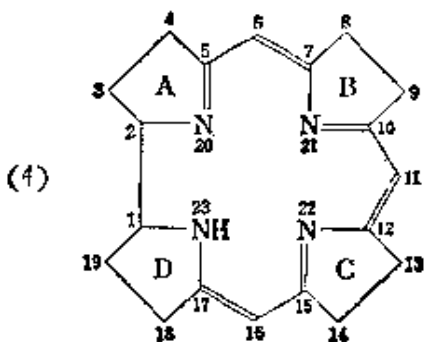
2,7,9-三氮杂菲



卟吩 (porphine)



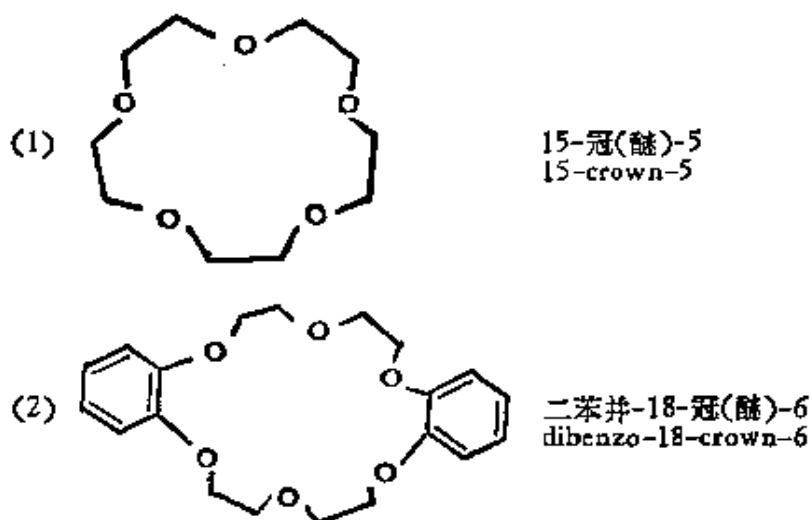
吗啉 (morpholine)



可琳 (corrin)

(二) 冠醚

冠醚是对环状多醚的总称。命名时,把环上所含原子的总数标注在“冠”字之前,其中所含氧原子数标注在名称之后。



6. 立体化学

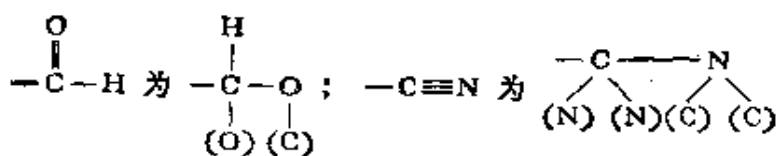
6.1 次序规则 (sequence rule)

为了表达某些立体化学关系,须决定有关原子或集团的排列次序,其方法叫次序规则。主要内容如下:

(1) 将各种取代基的原子按其原子序数大小排列,大者为“较优”基团。若为同位素,则质量高的定为“较优”基团。例如: $\text{Cl} > \text{O} > \text{C} > \text{H}$; $\text{D} > \text{H}$ (其中“ $>$ ”表示“优于”)。

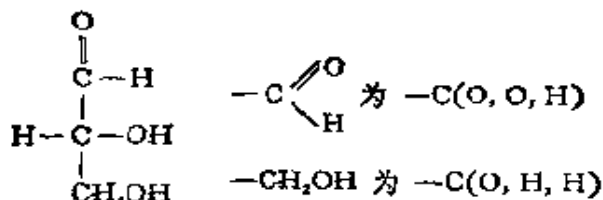
(2) 如果两个基团的第一个元素相同(例如碳),则比较与它直接相连的几个原子。比较时,按原子序数排列,先比较各组中最大者;若仍相同,再依次比较第二、第三个。例如 $\text{Cl}, \text{H}, \text{H} > \text{O}, \text{O}, \text{C}$; $\text{Cl}, \text{O}, \text{H} > \text{Cl}, \text{C}, \text{C}$ 。若仍相同,则沿取代链逐次相比(见后面乙烯基与异丙基的比较)。

(3) 含有双键和三键基团,可以认为连有两个或三个相同原子。

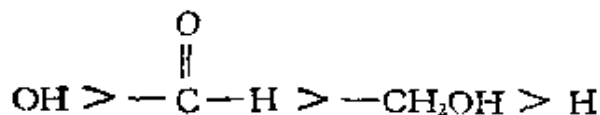


例:

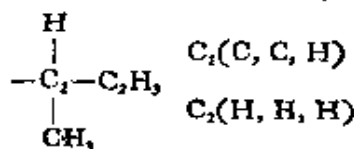
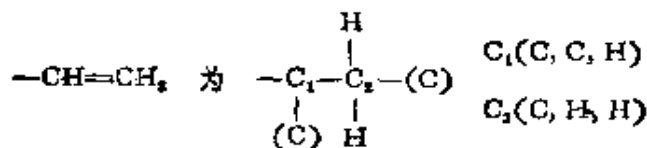
①



中心碳的四个取代基次序为:

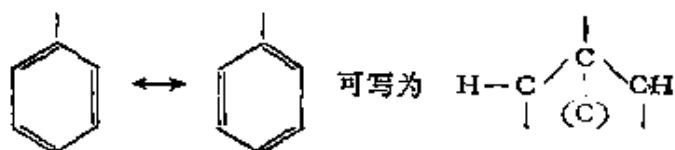


②乙烯基和异丙基:

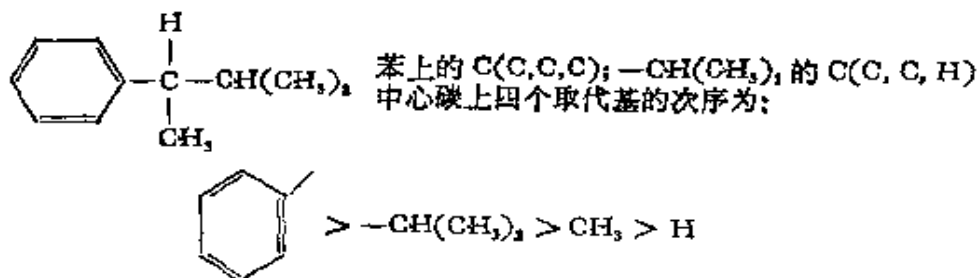


两个基团的 C_1 相同, C_2 不同, $(\text{C}, \text{H}, \text{H}) > (\text{H}, \text{H}, \text{H})$ 则乙烯基优于异丙基。

③芳环按 Kekulé 结构处理:


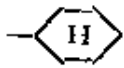
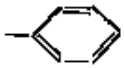
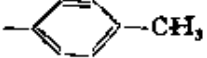
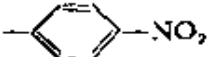
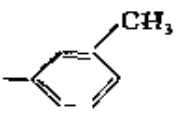


例:

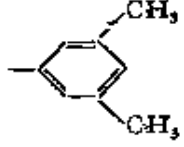
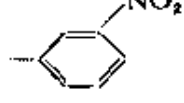
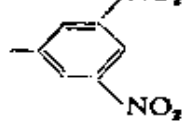
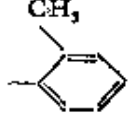
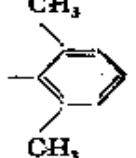
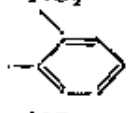
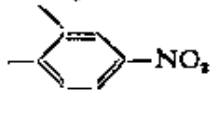
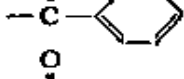


(4) 若原子的键不到四个(氢除外),可以补加原子序数为零(其次序排在最后)的“假想原子”,使之达到四个,在一些骨架固定的含氮化合物,氮的“孤电子对”即属此种情况。

下表列出 76 个原子或基团的优先顺序,编号较大者优于序号较低者。

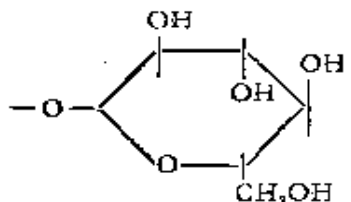
编 号	基 团 名	构 造 式
1	氢 (hydrogen)	-H
2	甲基 (methyl)	-CH ₃
3	乙基 (ethyl)	-CH ₂ CH ₃
4	丙基 (propyl)	-CH ₂ CH ₂ CH ₃
5	丁基 (butyl)	-CH ₂ (CH ₂) ₂ CH ₃
6	戊基 (pentyl)	-CH ₂ (CH ₂) ₃ CH ₃
7	己基 (hexyl)	-CH ₂ (CH ₂) ₄ CH ₃
8	异戊基 (isopentyl)	-CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃) ₂
9	异丁基 (isobutyl)	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂
10	烯丙基 (allyl)	-CH ₂ CH=CH ₂
11	新戊基 (neopentyl)	-CH ₂ C(CH ₃) ₃
12	2-丙炔基 (2-propynyl)	-CH ₂ C≡CH
13	苄基(苯甲基) (benzyl)	-CH ₂ - 
14	异丙基 (isopropyl)	-CH(CH ₃) ₂
15	乙烯基 (vinyl)	-CH=CH ₂
16	仲丁基 (sec.-butyl)	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃
17	环己基 (cyclohexyl)	- 
18	1-丙烯基 (1-propenyl)	-CH=CHCH ₃
19	叔丁基 (tert.-butyl)	-C(CH ₃) ₃
20	异丙烯基 (isopropenyl)	-C(CH ₃)=CH ₂
21	乙炔基 (ethynyl)	-C≡CH
22	苯基 (phenyl)	- 
23	对甲苯基 (p-tolyl)	- 
24	对硝基苯基 (p-nitrophenyl)	- 
25	间甲基苯基 (m-tolyl)	- 

续表

编 号	基 团 名	构 造 式
26	3,5-二甲苯基 (3, 5-xylyl)	
27	间硝基苯基 (<i>m</i> -nitrophenyl)	
28	3,5-二硝基苯基(3, 5-dinitrophenyl)	
29	1-丙炔基 (1-propynyl)	$-\text{C}\equiv\text{CCH}_3$
30	邻甲苯基 (<i>o</i> -tolyl)	
31	2,6-二甲苯基 (2, 6-xylyl)	
32	三苯甲基 (trityl)	$-\text{C}(\text{C}_6\text{H}_5)_3$
33	邻硝基苯基 (<i>o</i> -nitrophenyl)	
34	2,4-二硝基苯基(2, 4-dinitrophenyl)	
35	甲酰基 (formyl)	$-\text{C}(=\text{O})\text{H}$
36	乙酰基 (acetyl)	$-\text{C}(=\text{O})\text{CH}_3$
37	苯甲酰基 (benzoyl)	
38	羧基 (carboxy)	$-\text{C}(=\text{O})\text{OH}$

续表

编号	基团名	构造式
39	甲氧羰基(甲酯基) (methoxycarbonyl)	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ -\text{C}-\text{OCH}_3 \end{array}$
40	乙氧羰基 (ethoxycarbonyl)	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ -\text{C}-\text{OCH}_2\text{CH}_3 \end{array}$
41	苄氧羰基 (benzyloxycarbonyl)	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ -\text{C}-\text{OCH}_2-\text{C}_6\text{H}_5 \end{array}$
42	叔丁氧羰基 (<i>tert.</i> -butoxycarbonyl)	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ -\text{C}-\text{OC}(\text{CH}_3)_3 \end{array}$
43	氨基 (amino)	$-\text{NH}_2$
44	铵基 (ammonio)	$-\overset{\oplus}{\text{N}}\text{H}_3$
45	甲氨基 (methylamino)	$-\text{NHCH}_3$
46	乙氨基 (ethylamino)	$-\text{NHCH}_2\text{CH}_3$
47	苯氨基 (phenylamino)	$-\text{NH}-\text{C}_6\text{H}_5$
48	乙酰氨基 (acetylamino)	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ -\text{NH}-\text{C}-\text{CH}_3 \end{array}$
49	苯甲酰氨基 (benzoylamino)	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ -\text{NH}-\text{C}-\text{C}_6\text{H}_5 \end{array}$
50	苄氧羰基氨基 (benzyloxycarbonylamino)	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ -\text{NH}-\text{C}-\text{OCH}_2-\text{C}_6\text{H}_5 \end{array}$
51	二甲氨基 (dimethylamino)	$-\text{N}(\text{CH}_3)_2$
52	二乙氨基 (diethylamino)	$-\text{N}(\text{CH}_2\text{CH}_3)_2$
53	三甲铵基 (trimethylammonio)	$-\overset{\oplus}{\text{N}}(\text{CH}_3)_3$
54	苯偶氮基 (phenylazo)	$-\text{N}=\text{N}-\text{C}_6\text{H}_5$
55	亚硝基 (nitroso)	$-\text{N}=\text{O}$
56	硝基 (nitro)	$-\text{NO}_2$
57	羟基 (hydroxy)	$-\text{OH}$
58	甲氧基 (methoxy)	$-\text{OCH}_3$
59	乙氧基 (ethoxy)	$-\text{OCH}_2\text{CH}_3$
60	苄氧基 (benzyloxy)	$-\text{OCH}_2-\text{C}_6\text{H}_5$
61	苯氧基 (phenoxy)	$-\text{O}-\text{C}_6\text{H}_5$

编号	基团名	构造式
62	葡氧基 (glucosyloxy)	
63	甲酰氧基(甲酰基) (formyloxy)	—O—C(=O)—H
64	乙酰氧基 (acetoxy)	—O—C(=O)—CH_3
65	苯甲酰氧基 (benzoyloxy)	$\text{—O—C(=O)—C}_6\text{H}_5$
66	甲基亚磺酰氧基 (methylsulfinyloxy)	—O—S(=O)—CH_3
67	甲基磺酰氧基 (methylsulfonyloxy)	$\text{—OSO}_2\text{CH}_3$
68	氟 (fluoro)	—F
69	巯基 (mercapto)	—SH
70	甲硫基 (methylthio)	—SCH_3
71	甲基亚磺酰基 (methylsulfinyl)	—S(=O)—CH_3
72	甲基磺酰基 (methylsulfonyl)	$\text{—SO}_2\text{CH}_3$
73	磺基 (sulfo)	$\text{—SO}_3\text{H}$
74	氯 (chloro)	—Cl
75	溴 (bromo)	—Br
76	碘 (iodo)	—I

6.2 顺、反异构

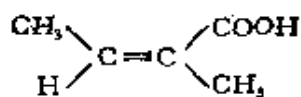
顺、反异构包括双键和环状化合物的顺、反异构体，根据原子或取代基彼此在双键平面或环骨架平面的同侧和异侧而定。

(一) 双键的顺、反异构

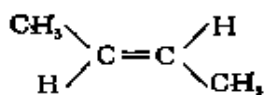
(1) 如果双键上一个碳原子连接的“较优”原子或基团与另一个碳原子连接的“较优”原子或基团(参阅6.1节次序规则的规定)，在双键平面同侧时，其构型用Z(德文 zusammen)表示。在双键平面异侧时，其构型用E(德文 entgegen)表示。Z、E写在括号里放

在化合物名称的前面。

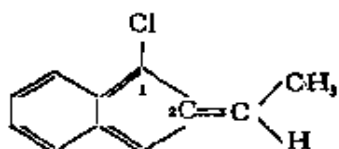
例:



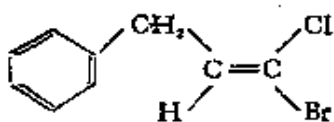
(Z)-2-甲基-2-丁烯酸



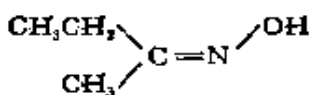
(E)-2-丁烯



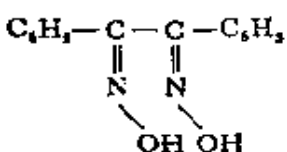
(Z)-2-亚乙基-1-氯-2H-萘



(E)-(3-氯-3-溴代烯丙)苯



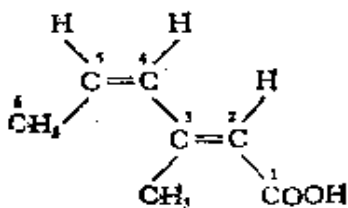
(Z)-丁酮醇



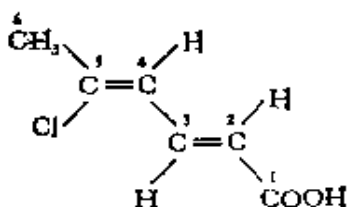
(Z, E)-联苯醌二醇

(2) 化合物中含有一个以上双键时, 每个双键按照(1)的规定确定 Z、E。命名时将 Z、E 写在相应双键位次标号的后面, 低位次的标号在前, 高位次标号在后, 放在化合物名称的前面。

例:

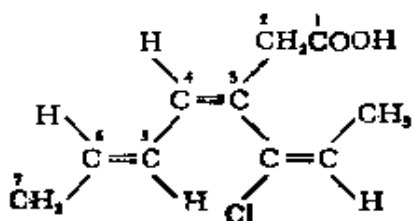


(2E, 4Z)-3-甲基-2, 4-己二烯酸

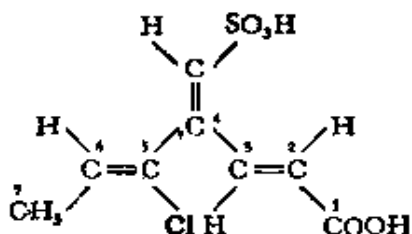


(2E, 4Z)-5-氯-2, 4-己二烯酸

若双键作为取代基时, 则符号 Z、E 置于取代基名称之前。



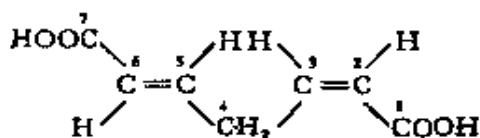
(3Z, 5E)-3-[(E)-1-氯-丙烯]-3, 5-庚二烯酸



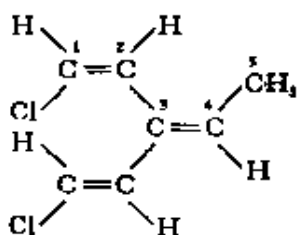
(2E, 5Z)-4-[(E)-磺胺亚甲基]-5-氯-2,5-庚二烯酸

当多烯烃主链的编号在遵循“使双键的编号尽可能小”的原则(见 2.13 节)以外,若有选择时,则规定编号由 Z 型双键端开始。

例:



(2Z, 5E)-2, 5-庚二烯二酸



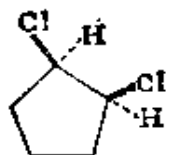
(1Z, 3Z)-3-[(E)-2-氯乙基]-1-氯-1, 3-戊二烯不叫 (1Z, 4E)-3-[(Z)乙基]-1, 5-二氯-1, 4-戊二烯

(注 Z > E)

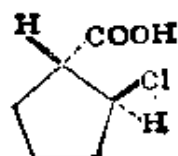
(二) 单环的顺、反异构

(1) 单环上两个相邻位置分别接一个取代基时,其立体关系用顺、反(cis, trans)表示,置名称之前,并后加“-”半字线。

例:



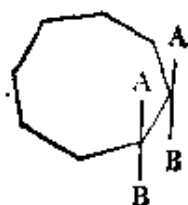
顺-1, 2-二氯环戊烷



反-2-氯环戊烷羧酸

规定环应以扩张状态表示,不应有凹角,以免得出相反的立体关系。

例:



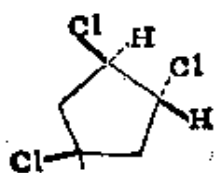
顺式(正确)



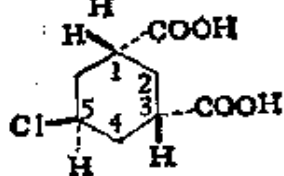
(错误的表示法)

(2) 环上有两个以上的位置各有一个取代基时,则择定其中位次最低者为对照基团,在其位次前加“*r*”(reference)标示,而其余取代基位次前用顺、反来表示它们与“对照基团”的立体关系。

例:



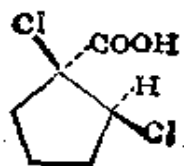
r-1, 反-2, 顺-4-三氯环己烷



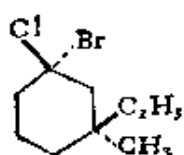
r-1, 反-5-氯, 顺-3-环己二甲酸

(3) 同一碳上有两个不同的取代基时,则把作为名称字尾的取代基定为“对照基团”,其所在位次应尽可能低;若化合物无名称词尾的取代基,则择其所在位次最低的一对取代基,按次序规则,定“较优基团”为对照基团;对其它位置上的取代基,只择其“较优基团”用顺、反来表示它们与对照基团的立体关系。

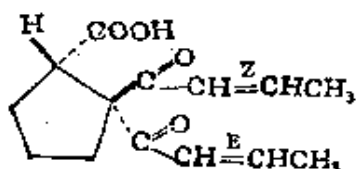
例:



1, 反-2-二氯-*r*-1-环戊烷甲酸



3-甲基-反-3-乙基-1-氯-*r*-1-溴环己烷

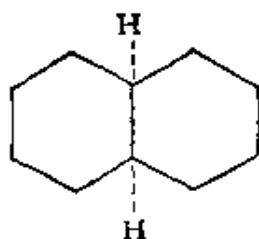


2-巴豆酰-反-2-异巴豆酰-*r*-1-环戊烷
甲酸(*Z* > *E*, 异巴豆酰优于巴豆酰)

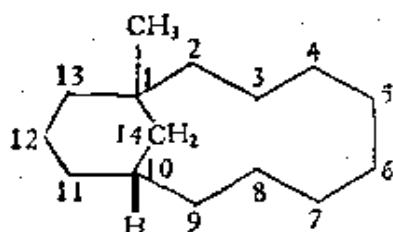
(三) 稠环的顺、反异构

(1) 桥烃的两个桥头之间的立体关系，也用顺、反表示；其联接方式称为顺联和反联。

例：



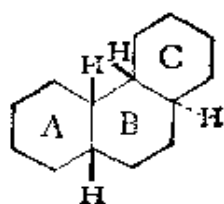
顺-十萘



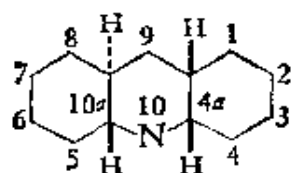
1-甲基-反-二环[8.3.1]十四烷

(2) 当饱和的桥头原子多于一对时，表示方法基本同桥烃，必要时在紧随“顺、反”和半字线之后，标出桥头原子的位次。而两对桥头之间的立体关系由相距最近距离（指两桥原子之间所连接的原子数最少的距离）来决定，用顺型（*cisoid*）和反型（*transoid*）描述，其后也加半字线，必要时在其后也标出桥头原子的位次。

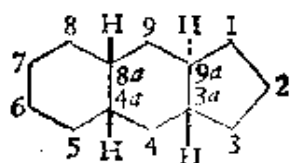
例：



顺-顺型-反-全氢菲



顺-顺型-4a, 10a-反-全氢吡啶
或 *rel*-(4a*S*, 8a*S*, 9a*S*, 10a*R*) 全氢吡啶



反-3a-顺型-3a, 4a-顺-4a-全氢苯并[1]茛
或 *rel*-(3a*R*, 4a*S*, 8a*R*, 9a*R*)-全氢苯并[1]茛

(有关 *R*, *S* 规则见下节)

两对桥头原子之间的距离相同时, 则以最低位次标示。复杂情况, 则用次序规则。

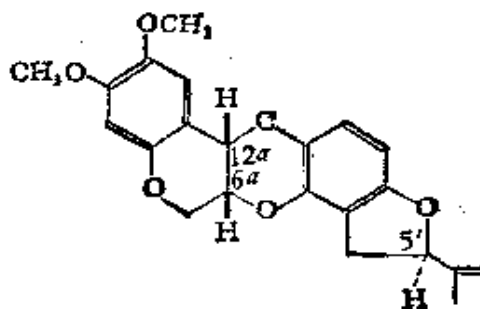
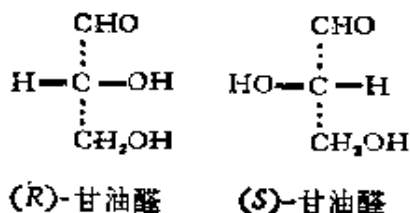
6.3 手性中心的构型表示法

(一) 旋光异构体的旋光方向用右旋(+), 左旋(-)及内消旋表示。

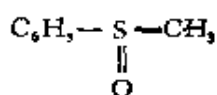
(二) 根据次序规则, 用 *R*, *S* 符号表示手性原子的构型:

(1) 若手性碳原子连接的四个不同的基团 *a*, *b*, *c*, *d* 按次序规则排列的先后次序为 *a* → *b* → *c* → *d*, 则把 *d* 作为手性碳原子四面体的顶端, *a*, *b*, *c* 为四面体底部的三角, 然后从四面体底部向顶端方向看 *a* → *b* → *c* 的排列顺序, 如为顺时针排列, 称为 *R* 型; 若为逆时针方向排列, 则称 *S* 型 (*R*, *S* 分别为拉丁文 *Rectus*, *Sinister* 的缩写, 意为“右”、“左”)。

例:



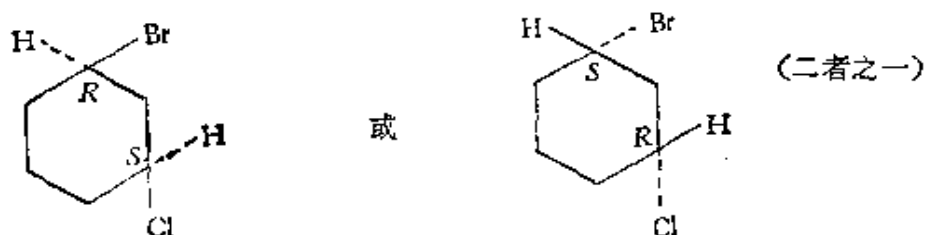
(6a*S*, 12a*S*, 5'*R*)-鱼藤酮



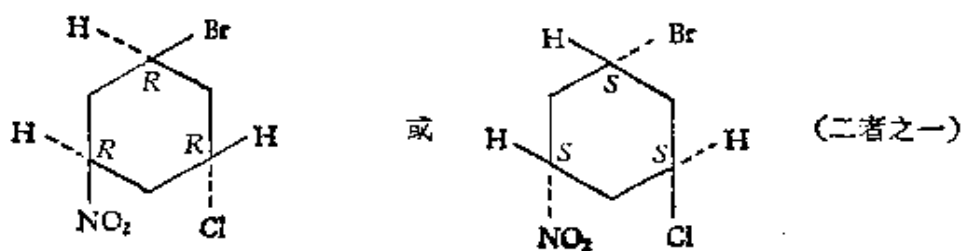
甲基·苯基(*R*)亚砜

(2) 相对构型已知, 绝对构型未知时, 用 R^* , S^* 表示, 前面标示位次; 在比较复杂情况时, 可省去星号, 而在总名称前用 *rel* (*relative*) 字头表示。

例:



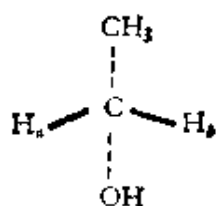
($1S^*$, $3R^*$)-1-氯-3-溴代环己烷



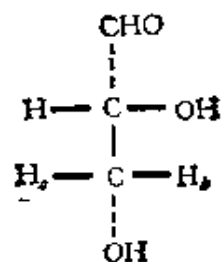
rel-($1R$, $3R$, $5R$)-5-硝基-3-氯-1-溴环己烷

(3) 在一个分子中可能有几个手性中心, 这些中心可能结构相同或不同; 也可能两个手性中心结构相同而其手性相反, 则整个分子是无手性的。

在一个化合物中, 其无手性中心(或原子)所连接的两个相同的原子或基团(如 63 页 (A) 或 (B) 图中 H_a 及 H_b)若被看作不同时, 则将导致手性, 此中心称为前手性(*prochirality*)。这两个相同的原子或基团实际上是有立体化学的区别, 是异位的(*heterotopic*)。如果前手性的亚甲基中的一个氢被氘取代, 则亚甲基的碳即为真正的手性中心, 此时化合物 (A) 为手性的, (B) 为两个非对映异构体中的一个。因此 (A) 中的前手性氢 H_a 及 H_b 为对映异位(*enantiotopic*), (B) 中的前手性氢 H_a 及 H_b 为非对映异位(*diastereotopic*)。



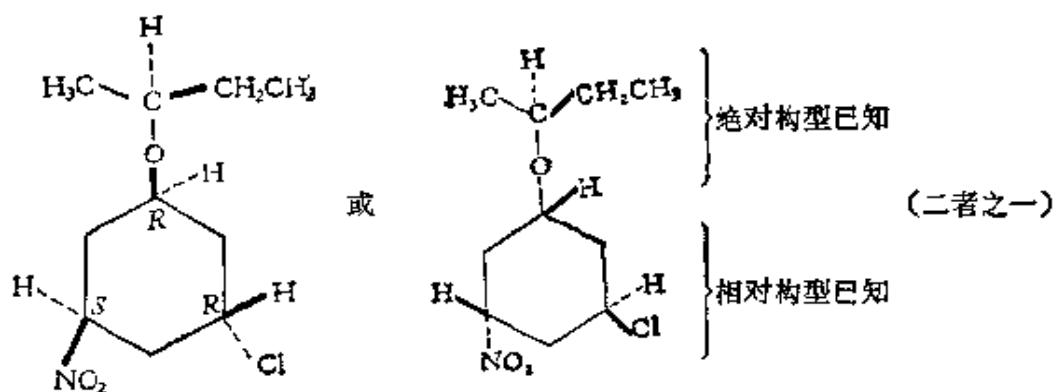
(A)



(B)

(4) 在相对构型已知的化合物中, 引入绝对构型已知取代基时, 相对构型部用 R^* 、 S^* 表示, 而不用 *rel*。

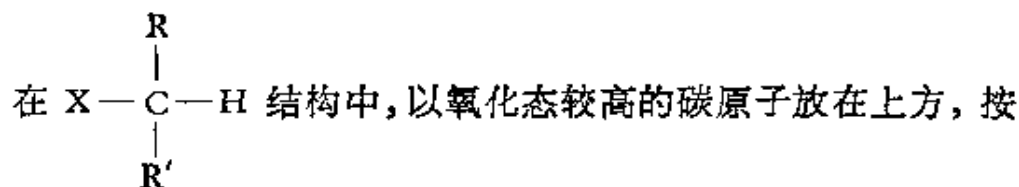
例:



($1R^*$, $3R^*$, $5S^*$)-5-硝基-[($1S$)-仲丁氧基]-3-氯环己烷

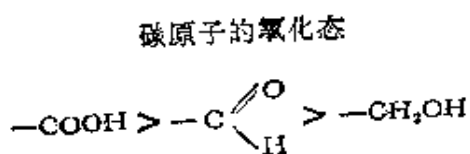
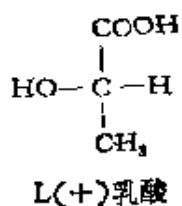
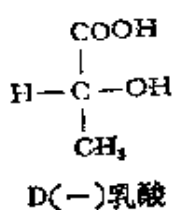
(三) 用 D、L 或俗名表示:

氨基酸、肽类、糖类、环多元醇及其衍生物的立体化学命名, 用 D、L 或俗名表示; 甾体用 α 、 β 和俗名表示; 萜类及生物碱, 当其绝对构型已知时, 用顺、反表示。当骨架上一系列双键均属同一立体化学类型时, 则用全顺或全反表示(详见 8 章)。



Fischer 投影法所得投影中, X 在右侧或左侧, 分别称为 D 型或 L 型。

例:

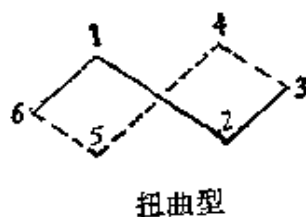
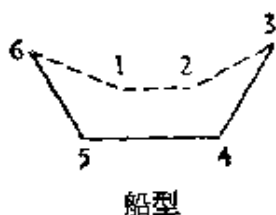
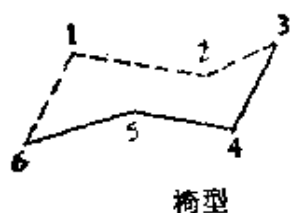


6.4 构象

(一) 椅型与船型:

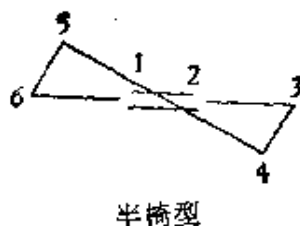
(1) 饱和六元环的六个原子中,若其中 1,2,4,5 位四个原子处于同一平面内,则把 3,6 位原子位于该平面异侧和同侧的构象,分别称为椅型和船型:由一种船型转变为另一种船型的中间构象,即 1,2,4,5 位的四个原子不再是共平面时,称为扭曲型。

例:



(2) 当六元环含有一个双键时,与双键不直接相连的 4,5 位两个原子与双键以平行或交叉形式存在,分别称其构象为半船型和半椅型。

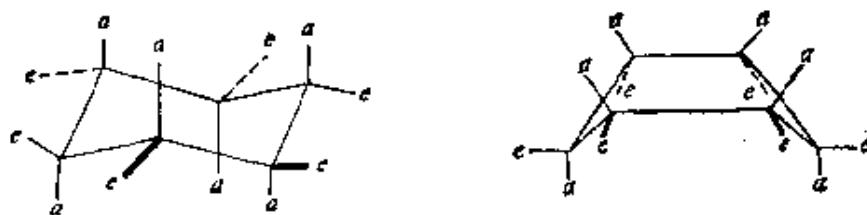
例:



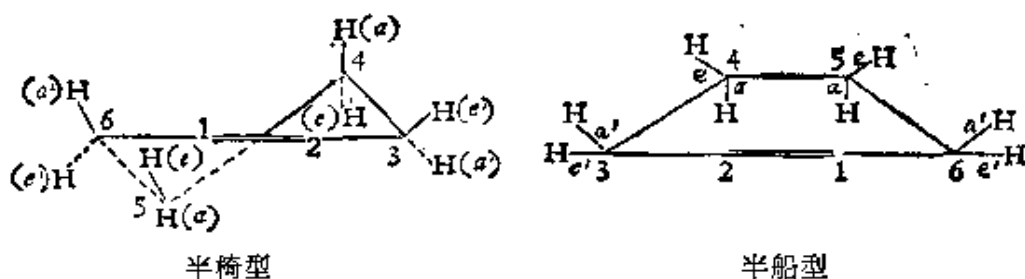
(二) 平伏键与直立键:

(1) 在船型和椅型构象中,与六元环中的正四面体原子相连的键,按其与环内多数原子构成的平面所成的夹角较大者称为直立键,较小者称为平伏键,分别以 a 和 e (axial 和 equatorial) 表示,命名时标示在所在位次后的括号内。

例:



(2) 在半船型和半椅型构象中,3,6位上有类似的 a 和 e 键, 分别称为假直立键和假平伏键,并分别用 a' 和 e' 表示: 4,5 位上的键仍以 a, e 表示。



(三)用扭转角描述分子构象的空间排列:

构象用 Newman 投影描绘由于单键旋转而产生的、非键合基团之间的夹角称为扭转角,用 θ 或 ω (希文)表示,顺时针旋转的角为正值,反时钟旋转的角为负值。扭转角及其构象名称、符号见下表:

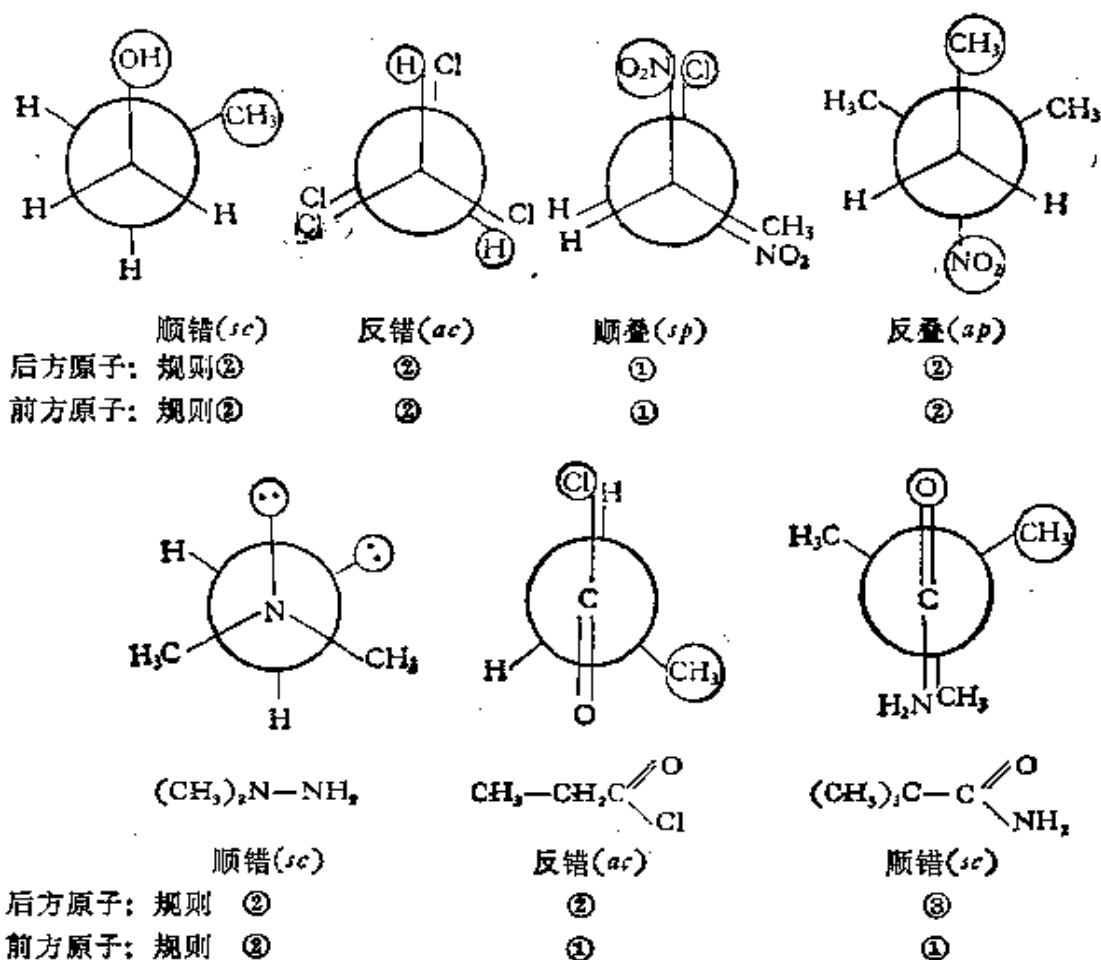
扭转角 θ^*	0°	$\pm 60^\circ$	$\pm 120^\circ$	$\pm 180^\circ$
构象名称	顺叠	顺错	反错	反叠
符号	sp (synperiplanar)	sc (synclinal)	ac (anticlinal)	ap (antiperiplanar)
举例				

* 各种扭转角均有 $\pm 30^\circ$ 的幅度。

Newman 投影扭转角的确定是取决于前后两个原子上的取代基,根据以下规则择定取代基:

- ① 取代基都不同时,按次序规则选定“较优基团”。
- ② 两个取代基相同时,选择第三个取代基。
- ③ 取代基都相同时,则采用最小的扭转角。

例:



注: 图中用加圈的基团是根据上面的三条原则择定的取代基; 圈内的“· ·”表示孤电子对, 视作最小取代基, 原子序数定为零。

7. 变丰化合物

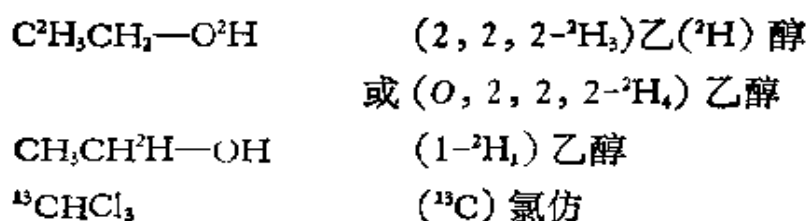
有些元素有几种核素 (nuclide), 例如 ^1H , ^2H , ^3H (氕, 氘, 氚) 就是氢的三种核素。若化合物中至少有一种核素的丰度与天然比

例有所不同,即称为变丰化合物。

7.1 同位素取代化合物

若在所有的分子中,某一(或 n 个)指定的位置上的某一(或 n 个)元素均(基本上 100%)为某核素所占据,而在其他位置上的核素组成仍为天然丰度,则称同位素取代化合物。命名时将位次标号及核素符号连同必要的下标数字都放在圆括号内。

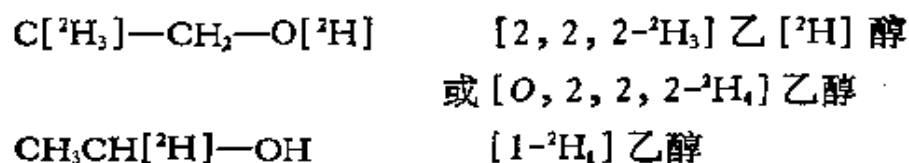
例:



7.2 特定标记化合物

在实践中往往难于达到 100% 的标记程度。若除同位素取代化合物(只含一种)外,尚有所稀释(即含天然丰度的分子*),则该混合物为特定标记化合物。命名法与上法相同,但改用方括号。

例:



上面所举 [1- 2H_1]乙醇的例子,虽然样品有可能是高度稀释的(即,绝大部分是未标记的普通乙醇),但所有的标记分子的亚甲基都只含一个氘,不杂有二氘标记者。

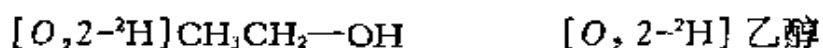
7.3 选择性标记化合物

在制备操作中,有时也很难得到特定标记的化合物。一般情

* 系指宏观的丰度比值而言。若从单个分子来看,所谓天然丰度的样品其实仍然是一个混合物。

况下,往往只能确定标记的位置,但不一定能够确定每一种核素的数目。这种样品称之为选择性标记化合物。可以看出,样品中所含同位素取代化合物有一种以上。由于杂有普通的未标记的分子(往往是大量的),当然也可以认为是几个特定标记化合物的混合物。命名时仍用方括号,须省去下角数码。

例:



表明除 OH 有氚标记外,甲基也被标记,但甲基有一氚代,二氚代,三氚代等三种情况(或有其中之一;若只有一种且为单氚代,在与羟基丰度相同时,则成特定标记化合物)。有时也需加下角数码。

例:



表明样品中除普通乙醇外,还含有两种同位素取代的分子,其一为 $\text{CH}^3\text{H}_2\text{CH}_2\text{OH}$, 另一为 $\text{CH}^3\text{H}_1\text{CH}_2\text{-}^{18}\text{OH}$ 。

7.4 非选择性标记化合物

若标记位置不明确,称为非选择性标记化合物。命名时只用核素符号放在方括号里表示。

例:

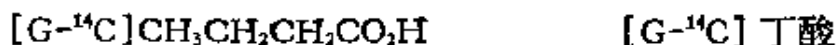


表明在甲基,亚甲基及羟基上均可能有所标记。

7.5 全标记化合物

除普通分子外,在全部位置上均无例外地有所标记,则以 G (General) 表示。

例:



表示不一定含有四个碳同时被标记的丁酸分子。只是在混合物中全部位置均有所标记,而无遗漏。

7.6 均匀标记化合物

在分子中,除全部位置上有所标记外,其各个位置标记的宏观丰度比值也相同,称为均匀标记。以 U(uniform) 表示之。

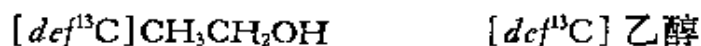
例:



7.7 贫同位素化合物

若某一核素低于天然丰度,为贫同位素化合物。可用 *def* (deficient) 表示。

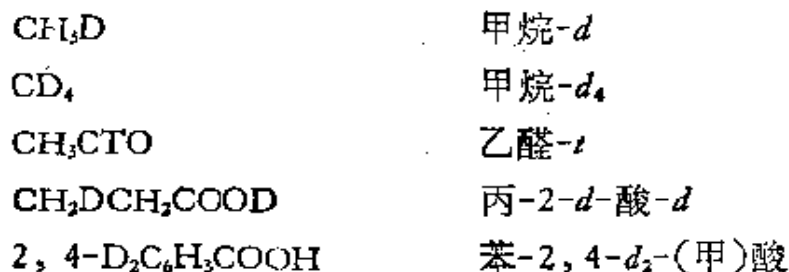
例:



若按 7.7 节,也可命名为 $[^{13}\text{C}]$ 乙醇。

另有一套命名法,目前仍为《化学文摘》所沿用,一般文献中仍较常见。现仅举数例,介绍其氘、氟化合物的命名。

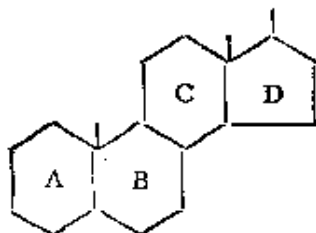
例:



8. 天然化合物

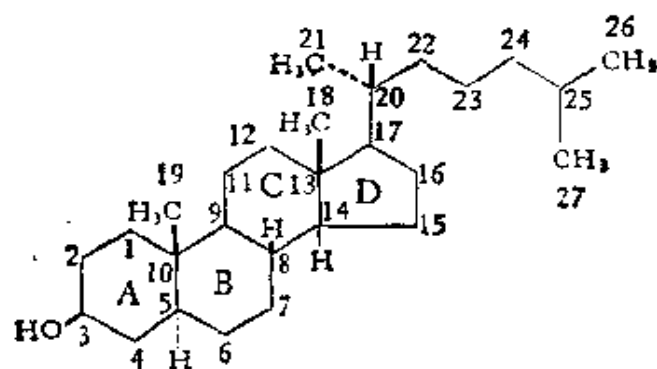
8.1 甾族化合物

凡具有以下碳骨架的化合物,称为甾族化合物。

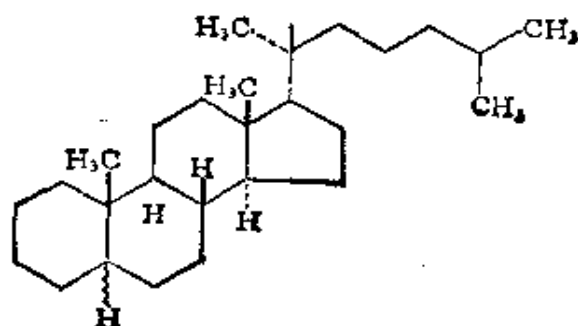


甾族化合物的命名是以其烃类的基本结构作为母体名称并加上前、后缀表明取代基的位次和名称来构成。分子内的手性中心用 *R* 或 *S* 表示, 取代基用 α 、 β 和 ξ 来表示其构型。

(一) 碳环的字母及碳原子的编号。



5 α -胆甾烷-3 β -醇
(5 α -cholestan-3 β -ol)



5 ξ -胆甾烷
(5 ξ -cholestane)

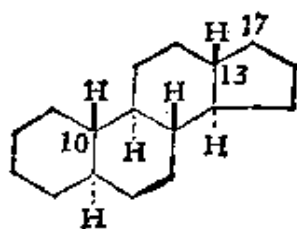
(二) 与甾环相连的原子或基团的构型规定如下:

- (1) 在平面之下, 称为 α 键, 用虚线 (----) 表示。
- (2) 在平面之上, 称为 β 键, 用粗实线 (——) 表示。
- (3) 未知构型者, 称为 ξ 键, 用波线 (~~~~) 表示。

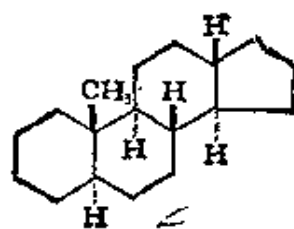
(三) 所有环接合点, 一定要用 H 和 CH₃ (或 Me) 表明。

(四) 除非另有说明, 甾族的命名包含在 8, 9, 10, 13, 14 和 17 的构型, 5-H 常用 5 α , 5 β 或 5 ξ 表明。

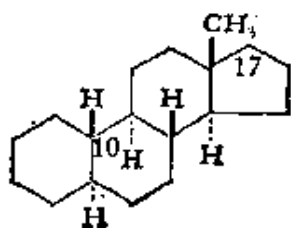
(五) 基本甾环的命名 (5 α -系列)。



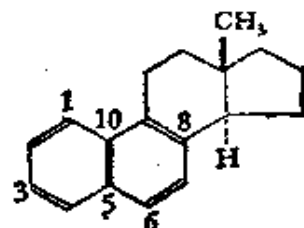
5 α -腺甾烷 (C-10, 13, 17 无取代基)
(5 α -gonane)



18-失碳-5 α -雄甾烷
(18-nor-5 α -androstane)



5 α -雌甾烷 (C-10, 17 无取代基)
(5 α -estrane)

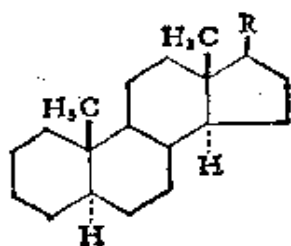


1, 3, 5(10), 6, 8-雌甾五烯
(1, 3, 5(10), 6, 8-estrapentaene)

7. R:H 5 α -雄甾烷 (5 α -androstane)

8. R:C₂H₅ 5 α -孕甾烷 (5 α -pregnane)

9. R: 5 α -胆甾烷* (5 α -cholestane)
[5 β -胆甾烷不叫粪甾 (coprostan)]

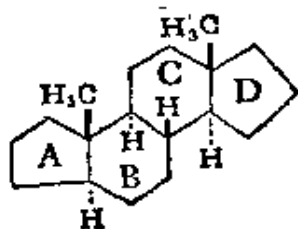


10. R: 5 α -麦角甾烷**
(5 α -ergostane)

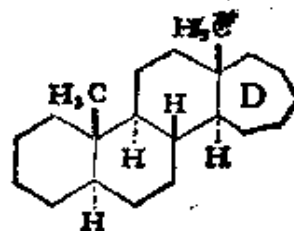
11. R: 5 α -豆甾烷***
(5 α -stigmastane)

* 20R 构型 +24S 构型 ≠24R 构型

(六) 缩环和扩环: 缩环用失碳 (nor)、扩环用加碳 (homo) 表示, 并用大写字母 A、B、C、D 放在加碳或失碳之前, 标明所指的环。

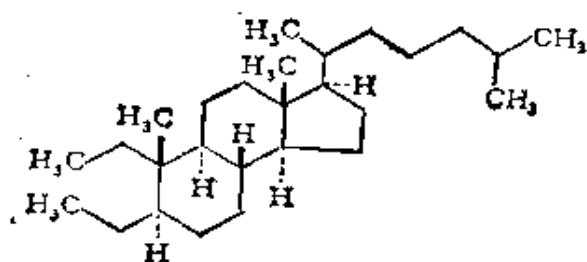


A-失碳-5 α -雄甾烷
(A-nor-5 α -androstane)

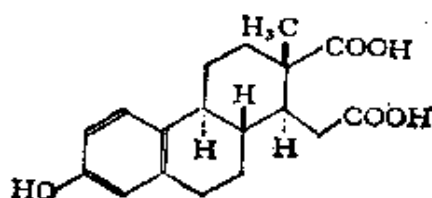


D-双加碳-5 α -雄甾烷
(D-dihomo-5 α -androstane)

(七)开环：甾环裂开用字头开环或裂 (seco) 表示。



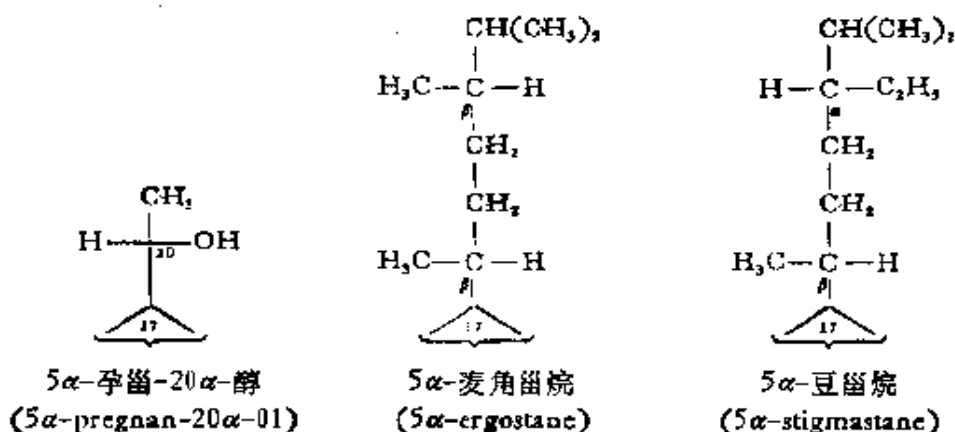
2, 3-开环(或裂)-5 α -胆甾烷
(2, 3-seco-5 α -cholestane)



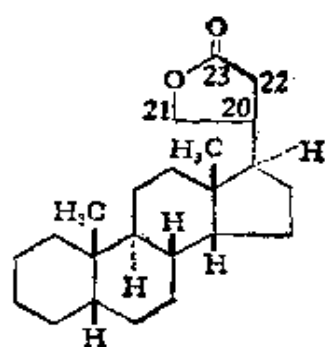
3-羟基-16, 17-开环-1, 3, 5(10)-雌甾三烯-16, 17-双酸
[3-hydroxy-16, 17-seco-1, 3, 5(10)-estratriene-16, 17-dioic acid]

(八)几个惯例:

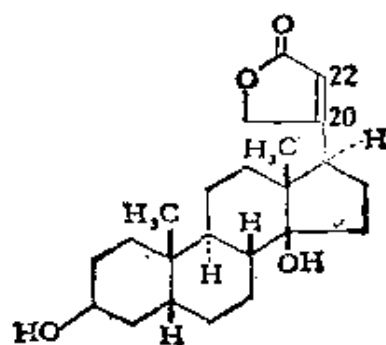
(1) 在孕甾烷中, C-20 的构型: 当侧链给以 Fischer 投影, 最大编号的碳应处顶部, 则取代基在 C-20 右侧者称为 α , 反之称为 β 。



(2) 心甾内酯。用于完全饱和系统的类毛地黄内酯。C-5 和 C-14 的构型必需指明; 天然存在的不饱和内酯, 用心甾烯内酯并用阿拉伯数字标明烯键的位置。

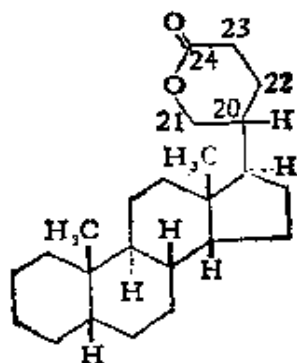


5 β , 14 β -心甾内酯
(5 β , 14 β -cardanolide)

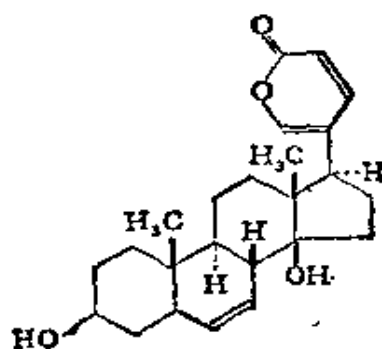


3 β , 14-双羟基-5 β , 14 β -心甾-
20(22)-烯内酯(=毛地黄苷元)
[3 β , 14-dihydroxy-5 β , 14 β -card-
20(22)-enolide(=digitoxigenin)]

(3) 蟾甾内酯。用于完全饱和系统的海葱-蟾蜍属内酯；C-5、C-14 构型必须说明。蟾甾双烯内酯、蟾甾三烯内酯等用于天然存在的含有二个或三个双键的不饱和内酯。

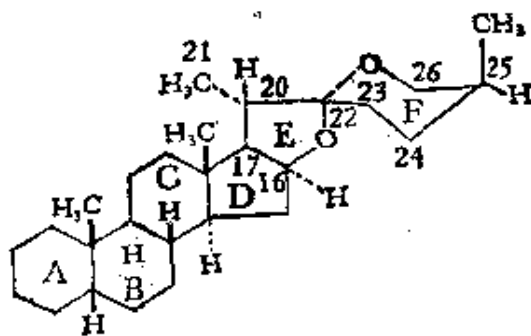


5 β , 14 β -蟾甾内酯
(5 β , 14 β -bufanolide)

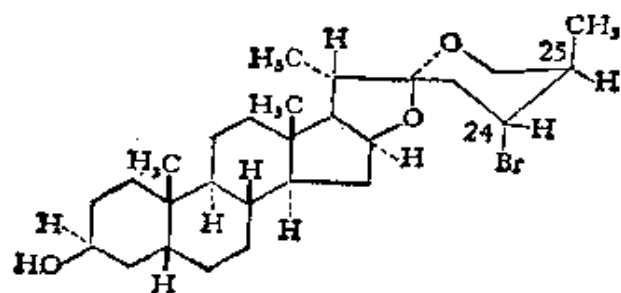


3 β , 14-双羟基-14 β -蟾甾-6, 20, 22-
三烯内酯(=海葱苷元)
[3 β , 14-dihydroxy-14 β -bufa-b, 20, 22-
trienolide(=scillarenin)]

(4) 螺甾。下列结构命名时,必须标明 C-5、C-25 的构型。

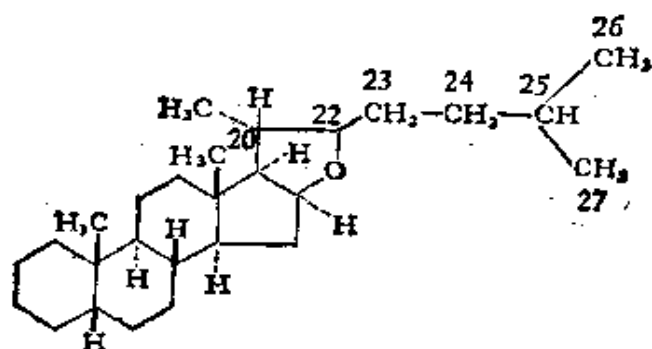


(25S)-5 β -螺甾烷
[(25S)-5 β -spirostan]

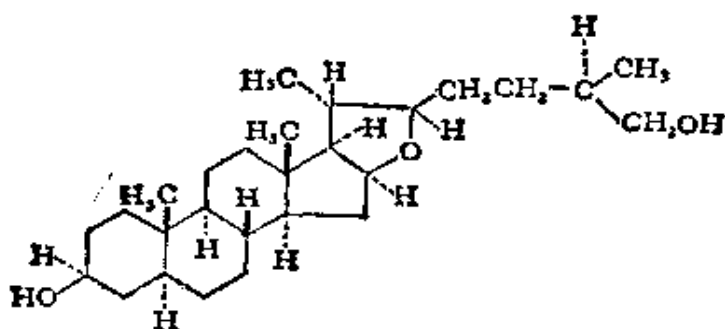


(24R, 25R)-24-溴-5 β -螺甾-3 β -醇
 [(24R, 25R)-24-bromo-5 β -spirostan-3 β -ol]

(5) 呋甾。下列结构命名时必须标明 C-5、C-22 及 C-25 的构型。

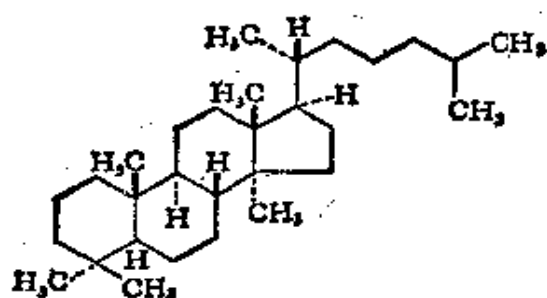


(22R)-5 β -呋甾烷
 [(22R)-5 β -furostan]

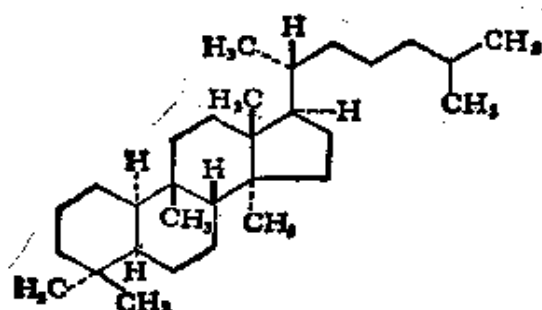


(20S, 22S, 25R)-5 α -呋甾-3 β , 26-二醇 (=双氢假惕告吉宁)
 [(20S, 22S, 25R)-5 α -furostan-3 β , 26-diol (=dihydroxypseudotigogenin)]

(6) 四环三萜视为三甲基甾体。三个外加甲基的编号为 30、31、32，它们分别接于 C-4 (α 型)、C-4 (β 型) 和 C-14 (α 型)。



4, 4, 14 α -三甲基-5 α -胆甾烷(=羊毛甾烷)
[4, 4, 14 α -trimethyl-5 α -cholestane (=lanostane)]



19(10→9 β) 移-5 α , 10 α -羊毛甾烷(=5 α -葫芦烷)
[19(10→9 β)abeo*-5 α , 10 α -lanostane(=5 α -cucurbitane)]

* abeo-(Latin) 表示键移位

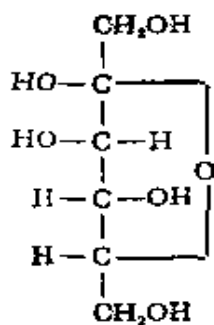
8.2 碳水化合物(即糖类化合物)

(一)基本结构与主体化学:

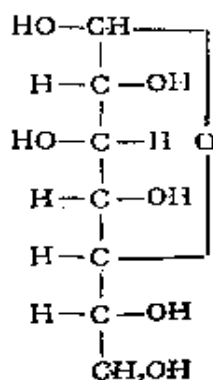
具有多羟基醛或酮的结构, 通称为糖。简单的单糖, 如赤藓糖、阿(拉伯)糖、核糖、葡萄糖等命名以俗名为主。并用特定的前缀符号或前缀词表示主体化学结构的性质。

α -, β -表示糖苷碳原子的构型; D-, L-表示序号最高的手性碳原子的绝对构型; 赤藓-等前缀词表示有关碳原子的相对构型。

另外, 也可用以词尾表示该化合物归属的种类的方法命名。例如呋喃糖、酮糖、糖酸等



β -D-果糖
或 β -D-阿拉伯-2-己酮呋喃糖



β -D-甘油-D-葡庚吡喃糖

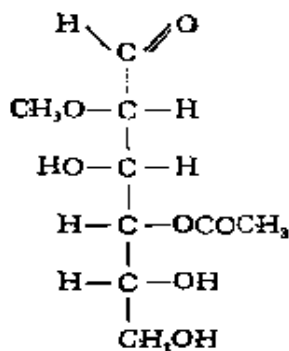
(二) 取代衍生物:

(1) 糖分子内羟基上的氢被取代时, 可直接使用该取代基的化学名称。

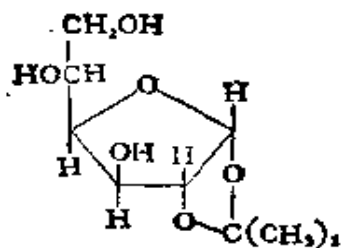
(2) 糖分子内的羟基被氢取代, 以“脱氧”表示; 羟基被其它基团取代的, 则在“脱氧”之前加上取代基的名称。

(3) 呋喃环或吡喃环上半缩醛的羟基称(糖)苷羟基, 该羟基中的氢被某一基团取代后生成的化合物称(糖)苷。取代基团则称为配糖基; 糖的部分则称为糖苷基; 全名的形式为某糖某苷。

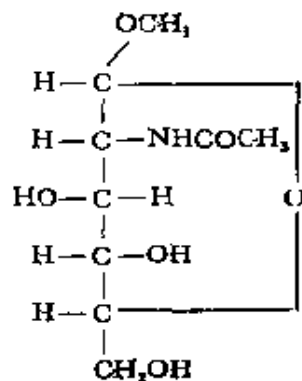
例如:



2-O-甲基-4-O-乙酰-D-甘露糖



1, 2-O-异亚丙基- α -D-葡-呋喃糖



N-乙酰- α -D-氨基葡萄糖甲苷或 2-乙酰氨基-2-脱氧- α -D-葡呋喃糖甲苷

(三) 还原和氧化产物:

(1) 单糖的醛基被氢化成羟基后称为糖醇。

(2) 单糖的醛基或半缩醛基被氧化成羧基后称为糖酸。

(3) 伯醇基被氧化成羧基的单糖,称为糖尾酸。

(4) 单糖分子的二端若都变为羧基,则称之为糖二酸。

8.3 核 酸

核酸有两大类:一是核糖核酸,也可用 RNA 表示。二是脱氧核糖核酸,也可用 DNA 表示。它们都是生物大分子化合物,分别由核苷酸和脱氧核苷酸组成。

核苷酸由氮杂环碱基、核糖苷基和磷酸基三部分组成。各个不同核苷酸的命名,取碱基的字头,加“核苷酸”而成。如腺(核)苷酸、胞(核)苷酸等。脱氧核苷酸的命名方法与核苷酸相同,并加前缀词“脱氧”。例如脱氧腺(核)苷酸、脱氧胞(核)苷酸等。

核苷由氮杂环碱基和核苷基组成,其命名除了无磷酸外,其余均与核苷酸相同。如腺(核)苷、脱氧腺(核)苷等。

上述名称中的“核”字,一般可以省略,但若为区别于其它糖苷基组成的类似物时,则不能省。如腺核糖苷、腺阿拉伯糖苷、胞葡萄糖苷等。

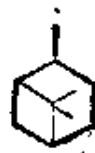
8.4 萜类化合物

萜类环系的命名按英文俗名意译,再接上一个“烷”字。有少数名称沿用英文音译(第一节音译加“烷”字)已久,则在括弧内加以注明。

例:



对薄荷烷
(对萜烷)
(*p*-menthane)



松节烷
(萜烷)
(pinane)

(一)部分单萜类环系:

(1) 无环型:

月桂烷 薰衣草烷 艾蒿烷 异艾蒿烷
(myrceane) (lavendulane) (artemisane) (iso-artemisane)

(2) 单环型:

环异艾蒿烷 菊化烷 光月桂烷
(cycloiso-artemisane) (chrysanthemane) (photomyrceane)

桂花烷 异香芹烷 别香芹烷 维奥拉烷 柯斯塔烷
(osmane) (iso-carvane) (allo-carvane) (violacane) (costalane)

新侧柏烷 兰按烷 别侧柏烷 光樟烷
(neo-thujane) (globulane) (allo-thujane) (photocamphane)

对薄荷烷(对盖烷) 间薄荷烷 光薷烷 异光薷烷
(*p*-menthane) (*m*-menthane) (photocarane) (iso-photocarane)

邻薄荷烷 环香叶烷 异环香叶烷 优香芹烷
(*o*-menthane) (cyclogeraniane) (iso-cyclogeraniane) (eucarvane)

西红檀烷 异西红檀烷
(thujaplicane) (iso-thujaplicane)

(3) 二环型

侧柏烷(萜烷) 薷烷 松节烷(蒎烷) 樟烷(茨烷; 莛烷)
(thujane) (carane) (pinane) (camphane, bornane)

异樟烷(异茨烷) 小茴香烷(葑烷) 异小茴香烷(异葑烷)
(iso-camphane) (fenchane) (iso-fenchane)

新小茴香烷(新葑烷) 别小茴香烷(别葑烷)
(neo-fenchane) (allo-fenchane)

异光月桂烷 光柠檬烷 光侧柏烷 光优香芹烷
(iso-photomyrceane) (photocitrane) (photothujane) (photocucarvane)

异光优香芹烷
(iso-photoeucarvane)

(4) 三环型:

三环烷 环小茴香烷(环葑烷) 香芹樟烷
(tricyclane) (cyclofenchane) (carvonecamphane)

(二)部分倍半萜类环系:

(1) 无环型:

金合欢烷

(farnesane)

(2) 单环型

烟霉烷 甜没药烷 甜旗烷 旋光烷 榄香烷

(fumagilane) (bisabolane) (calacane) (humbertiane) (elemane)

单环金合欢烷 旋复花烷 牻牛儿烷(吉马烷)

(monocyclofarnesane) (inulicane) (germacrane)

蛇麻烷(葎草烷) 环异戊基月桂烷 苍耳烷 花柏烷

(humulane) (cycloiso-pentylmyrceane) (xanthinane) (nootkatane)

天竺烷

(pelargonane)

(3) 二环型:

倍半萜烷 倍半樟烷(倍半莢烷) 倍半小茴香烷

(sesquicarane) (sesquicamphane) (倍半葑烷)

(sesquifenchane)

亥明苏烷 沉香螺旋烷 蜂斗菜烷 葎澄茄烷 白龙胆烷

(helminthosporane) (agarospirane) (fukinane) (cadinane) (laserane)

芹子烷 佛术烷 缬草烷 金钟烷 血菟烷

(sefinane) (eremophilane) (valerane) (occidane) (iresane)

愈创烷 墨西哥烷 岩兰烷 茺蓼烷 胡萝卜烷

(guaiane) (mexicanane) (vetivane) (zicrane) (carotane)

桉柏烷 雪松烷 异缬草烷 香柠檬烷

(widdrane) (himachalane) (iso-valerane) (bergamotane)

β -檀香烷 丁香烷(石竹烷) 菖蒲烷 花侧柏烷

(β -santalane) (caryophyllane) (acorane) (cuparane)

环牻牛儿烷(环杏马烷) 勃勒烷 阿里亚烷 维鲁烷

(cyclogermacrane) (porledane) (alliacane) (verucalane)

念珠藤烷 海绵烷

(aplysane) (pallescensane)

(4) 三环型:

櫻草花烷 胡椒烷(玷吧烷;树兰烷) 橄榄烷 马兜铃烷
(birsutane) (copane, aglaiane) (maliane) (aristolane)
伊鲁烷 罗汉柏烷 芳萆烷 柏木烷 蒲尔旁烷
(illudane) (thujopsane) (aromadendrane) (cedrane) (bourbonane)
藿香烷 异藿香烷 三环岩兰烷 吉马松烷
(patchulane) (iso-patchulane) (tricyclovetivane) (germazane)
长叶松节烷(长叶蕨烷) 卡普烷 α -檀香烷 异柯母烷
(longipinane) (capnellane) (α -santalane) (iso-comane)
跨转烷 长叶烷 别丁香烷 异别丁香烷 非洲烷
(quadrane) (longifolane) (clovane) (iso-clovane) (africanane)

(5) 四环型:

长叶环烷 索拉烷
(longicyclane) (solanascane)

(三)常见的二萜类环系:

(1) 无环型:

植物烷
(phytane)

(2) 单环型:

维 A 烷 富司烷 樟脑烷 烟草烷(西松烷)
(vitamane A) (fusane) (camphorane) (cembrane)

(3) 二环型:

半日花烷 软珊瑚烷 棕海藻烷 科仑烷
(labdane) (soft-corane) (glossophorane) (columbane)

克罗烷
(clerodane)

(4) 三环型:

塔三烷 桃柝烷 卡斯烷 松香烷 香茶菜烷
(taxane) (tolarane) (cassane) (abietane) (rabdosane)

翠勒维烷 右旋海松烷 树心烷
(trinervitane) (dextropimarane) (vinharicane)

(5) 四环型:

贝壳松烷 扁枝烷 咖啡烷 白叶烷 赤霉烷
(kaurane) (phyllocladane) (cafestane) (beycrane) (gibbane)

阿替烷
(atisane)

(四)常见的三萜类环系:

(1) 无环型:

角鲨烷
(squalane)

(2) 三环型:

龙涎香烷 马拉巴烷
(ambreane) (malabaricane)

(3) 四环型:

原萜烷 葫芦苦素烷 大戟烷 达玛烷
(protostane) (cucurbitane) (euphane) (dammarane)

阿朴大戟烷 紫苑烷 甘遂烷 芒柄花烷 羊毛甾烷
(apoeuphane) (shionane) (triruculane) (onocerane) (lanostane)

(4) 五环型:

乔木萜烷 土当归烷(β -香树脂烷; 齐墩果烷) α -香树脂烷
(arborane) (oleane, β -amyrane) (α -amyrane)

绵马烷 何帕烷 锯齿石松烷 乌苏烷 吉曼烷
(filicane) (hopane) (serratane) (ursane) (germanicane)

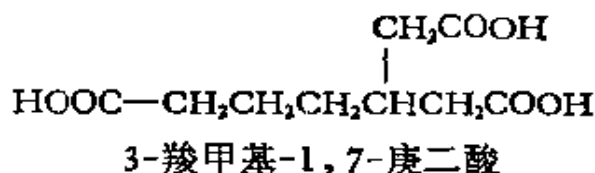
羽扇豆烷 木栓烷 蒲公英烷 谷汀烷 降香烷
(lupeane) (friedelane) (taraxastane) (glutinane) (bawerane)

8.5 有 机 酸

(一)脂肪酸(一元酸、二元酸、不饱和酸等)因其结构比较简单,一般按系统命名。但通用的俗名也可使用。

(1) 母体链的名称与烃类命名方法相同,只是以“酸”字作为词尾,编号方法见 2.13 节。

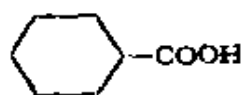
(2) 当羧基不直接接在母体链上时,该羧基则按取代基命名。



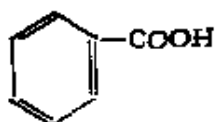
(3) 当羧酸分子具有几何异构或旋光异构等立体化学问题时,其命名原则见 6 章。

(二) 在脂环酸、多元酸、芳香酸和杂环酸中,以羧酸作为母体命名。

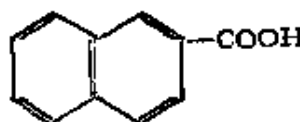
例:



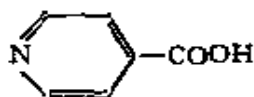
环己基甲酸



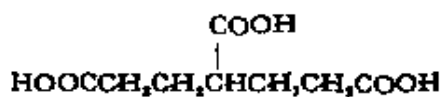
苯甲酸



2-萘甲酸



4-吡啶甲酸



1,3,5-戊烷三酸

(三) 使用命名原则命名,其名称冗长的酸类可采用俗名。

(四) 脂肪酸衍生物的命名方法见第 4 章。