

解读《有机化合物命名原则-2017》 ——新老命名原则的比较及常见取代基的命名

马宁, 王光伟*, 张文勤*

天津大学理学院化学系, 化学化工国家级实验教学示范中心(天津大学), 天津 300354

摘要: 对中国化学会新修订的《有机化合物命名原则-2017》与《有机化学命名原则》(1980)的不同之处进行解读, 对取代基命名的基本原则、取代基碳链编号的方式进行了归纳、分析, 整理汇总了本科有机化学教学中常见取代基的名称, 便于大家教学和交流。提出了有机化合物命名的系统化、规范化、简单化、一致化及“向后看齐”等原则, 取代基碳骨架无特殊编号规定时采用基碳原子编号为 1 的方案, 仅保留少数取代基俗名(普通名), 对于甲酰基相关基团的命名提出了建议。

关键词: 有机化合物; 命名; 取代基

中图分类号: G64; O6

Explanation of “Nomenclature of Organic Compounds-2017”: Comparison of Nomenclature Rules and Nomenclature of Common Substituent Groups

MA Ning, WANG Guangwei*, ZHANG Wenqin*

National Demonstration Center for Experimental Chemistry & Chemical Engineering Education (Tianjin University),
Department of Chemistry, School of Science, Tianjin University, Tianjin 300354, P. R. China.

Abstract: The differences between “Nomenclature of Organic Compounds-2017” and “Nomenclature of Organic Chemistry (1980)” issued by Chinese Chemical Society are described. The general principles and numbering methods for naming substituent groups commonly used in organic chemistry for undergraduates are analyzed and explained; the proper systematic names are recommended to benefit classroom teaching and academic communication. Moreover, the principles such as systemization, standardization, simplification, uniformization, and “looking afterward” are proposed. Some recommendations are further presented: 1) numbering the carbon skeleton of the substituent without compulsory numbering rule always begins at the point of attachment; 2) only preserving a minority of trivial names (common names); 3) naming methanoyl (formyl)-analogue groups following the name of methanoyl.

Key Words: Organic compounds; Nomenclature; Substituent group

《有机化合物命名原则-2017》^[1] (简称《2017》) 基于国际纯粹和应用化学联合会(IUPAC) 1993 年和 2013 年修订的有机化合物命名法(分别简称为《IUPAC1993》和《IUPAC2013》)^[2,3], 与国际接轨, 信息量大, 给从事有机化学教学工作的教师很好的启示与指导。但是书中有些取代基命名给出的选项多, 有时为了说明不同的概念, 同一取代基名称举例前后不一致, 这些无形中都会给一线教学工

作者的教学和化类相关专业学生的学习带来很多困惑。

有机化合物种类繁多, 结构千变万化, 这就决定了有机化合物命名的发展趋势是系统化、规范化、简单化和一致化。所谓系统化, 就是有机化合物和取代基越来越普遍地使用系统命名, 而俗名(普通名)的使用会越来越少; 所谓规范化就是同一类化合物主要趋向于采用一种规范的命名, 而不是百花齐放; 所谓简单化就是尽可能减少变化, 采用统一命名模式, 一种化合物只采用一种系统命名, 便于初学者掌握; 所谓一致化就是中英文命名趋于一致。

关于《2017》, 兄弟院校的教师相继给出了阐释^[4-6], 但由于《2017》与1980年制订的《有机化学命名原则》相比变化很大, 内容更多, 为使一线教学更加明确和统一, 更为详尽的阐释势在必行, 因此作者计划分两次对《2017》进行详细的解读。本文对《2017》的原则与规定进行概括, 主要整理并汇总了本科有机化学教学过程中常见取代基的命名, 在多年教学经验基础上, 对常见取代基的命名提出合理化建议, 我们即将出版的《有机化学》(第6版)对有机化合物的命名也进行了修订^[7]。

1 新命名原则的主要变化

《2017》与《有机化学命名原则(1980)》相比有下列几点显著不同。

1.1 取代基按英文字母顺序排列

命名时不同取代基先后次序不再依据次序规则, 而是按取代基英文字母的顺序依次排列, 简化了取代基的排序要求, 但需要掌握取代基的英文名称。

常见的甲基、乙基、丙基和丁基按照丁基(butyl)、乙基(ethyl)、甲基(methyl)、丙基(propyl)的顺序列出。需要注意的是, 表示相同取代基个数的 di、tri、tetra 不在取代基排序时考虑, 但是作为单一取代基名称之中的 di、tri 等要考虑进去, 如 1,1-dimethylpropyl 就要放在 ethyl 之前; 如果取代基英文名称完全相同, 数字小的放在前面, 如 1-chloroethyl 放在 2-chloroethyl 之前。

1.2 官能团位次紧挨官能团

以前母体官能团的位次放在母体碳数名称之前(从简原则), 新原则要求官能团的位次紧挨官能团名称, 虽然书写时多了“-”, 但是更加合理, 如“2-丁烯”改为“丁-2-烯”。

1.3 所有间隔符用英文字符

除汉字外, 所有间隔符号如括号、逗号、圆点、短横线不再采用中文半字符, 改为英文字符, 便于打字和排版。

1.4 选主链时不必优先考虑重键

选择主链时依次优选含最优先官能团数目最多、含杂原子数目最多、最长的链, 而非不饱和键最多的链; 有多条最长的链可选时, 再依次考虑含重键数目多、含取代基数目多的链。

2 常见取代基的命名

2.1 取代基命名基本原则

《2017》的宗旨是中英文取代基名称和排序尽量保持一致。应该说, 有机化合物的中文命名在系统化、规范化、简单化方面走在了世界前列。例如, 我们早已普遍使用“甲酰基”“乙酰基”等系统规范的名称, 而目前英文主要还是使用“formyl”“acetyl”等俗名, 相反英文系统名称“methanoyl”和“ethanoyl”还使用较少。

在教学过程中, 同一种取代基的命名越规范、变化越少、选项越少, 越有利于学生学习。如果同时给出化合物的中文名和英文名还不太容易造成混乱, 但是在平时交流时, 不可能先说英文名, 再说中文名。当只使用中文名时, 由于每一种取代基英文名有好几种叫法, 如果不加限制, 就会导致中文名中取代基排序混乱。因此, 为了便于学生掌握以及避免排序混乱, 本文只给出比较规范的取代基英文系统名称, 建议在中文命名时采用其对应的直译名称。

为了使有机化合物的命名系统化、规范化、简单化和一致化, 建议遵循“向后看齐”原则。所

谓“向后看齐”，是指同系物中前面的化合物(碳数较少)服从后面的(碳数较多)中英文命名规律，这样同系物的命名更加一致和规范，可使“教”和“学”更为容易。在取代基的命名中也应遵循这一原则，例如甲酰基(methanoyl)、乙酰基(ethanoyl)的系统命名就是与丙酰基(propanoyl)和丁酰基(butanoyl)等更多碳数同系取代基保持一致。

2.2 取代基碳链编号的两种方案

如果取代基上还有取代基，则须采用取代命名操作法对整个取代基进行命名，此时可能存在两种命名方案。

例如异丙基(可保留俗名)和仲丁基(不建议保留俗名)在《2017》中有两种系统命名(表 1)。方案一分别将它们命名为“1-甲基乙基”和“1-甲基丙基”，编号时总是从基碳原子开始，将其编号定为1；方案二分别将它们命名为“丙-2-基”和“丁-2-基”，即对取代基选择包含基碳原子的取代最多的最长碳链作为主链，并使基碳原子的编号尽可能小。《IUPAC2013》偏重方案二，这在 P-57.1.4 Retained prefixes no longer recommended 中明确表达了这一点，但本文建议使用方案一。理由有三：第一，《2017》在 164 页 5.4.3 部分明确指出，“链状取代基编号时通常总是将连接点(带游离价键)编为 1 位”，且在大多数举例中将方案一的命名排在方案二前，显然《2017》更偏重方案一；第二，多本正广泛使用的英文教材^[8-13]一致使用方案一，因此方案一更符合《2017》所提的中文命名与当前国际命名一致的基本原则；第三，从两种方案的英文来看，方案二的英文构词法经常更繁琐，例如叔丁基按方案二命名时学生必须掌握甲基的“methyl”和丙基的“propan-2-yl”两种构词方法，方案一则只需掌握前一种命名法即可，烷氧基的命名中也有类似构词法问题(表 1)。

表 1 方案一与方案二的比较

取代基	俗名	系统命名方案一	系统命名方案二
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{H}_3\text{C}-\text{CH}- \end{array}$	异丙基	1-甲基乙基 1-methylethyl	丙-2-基 propan-2-yl
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3\text{CH}_2-\text{CH}- \end{array}$	仲丁基(不建议保留)	1-甲基丙基 1-methylpropyl	丁-2-基 butan-2-yl
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{H}_3\text{C}-\text{C}- \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	叔丁基	1,1-二甲基乙基 1,1-dimethylethyl	2-甲基丙-2-基 2-methylpropan-2-yl
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2-\text{C}- \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	—	1,1-二甲基丁基 1,1-dimethylbutyl	2-甲基戊-2-基 2-methylpentan-2-yl
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{H}_3\text{C}-\text{C}-\text{O}- \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	叔丁氧基	1,1-二甲基乙氧基 1,1-dimethylethoxy	2-甲基丙-2-基氧基 2-methylpropan-2-yloxy


2.3 取代基命名的其他建议

在遵照上述原则的情况下，关于取代基的命名，本文给出以下其他建议。

2.3.1 取代基的俗名(普通名)

建议在陈述和交流过程中仅以下少数取代基可采用俗名：异丙基(isopropyl)、叔丁基(*tert*-butyl)、烯丙基(allyl)和苄基(benzyl)，而在系统命名书写时尽量不要掺杂这类取代基俗名，以免引起排序混乱。例如“1-甲基乙基(1-methylethyl)”应该排在“甲基(methyl)”之后。如果将其写成“异丙基(isopropyl)”，就要排在“甲基(methyl)”之前了。“甲酰基(methanoyl)”和“乙酰基(ethanoyl)”的英文名称构成与其后面的“丙酰基(propanoyl)”保持一致，建议在系统命名中不再使用其英文俗名“formyl”和“acetyl”，但“苯基(phenyl)”和“苯甲酰基(benzoyl)”作为少数例外可保留。

表2 有机化学本科教材中常见取代基的命名

取代基	英文系统名(俗名)	中文系统名(俗名)	取代基	英文系统名(俗名)	中文系统名(俗名)
H ₂ N—	amino	氨基	I—	iodo	碘
H ₂ NCO—	aminocarbonyl	氨甲酰基	—CH ₂ —	methanediyl	甲二基
H ₂ NCH ₂ —	aminomethyl	氨甲基	HCO—	methanoyl (formyl)	甲酰基
	benzoyl	苯甲酰基	HCOO—	methanoyloxy	甲酰氧基
Br—	bromo	溴	CH ₃ O—	methoxy	甲氧基
BrCH ₂ CH ₂ —	2-bromoethyl	2-溴乙基	CH ₃ —	methyl	甲基
BrCH ₂ —	bromomethyl	溴甲基	CH ₃ NH—	methylamino	甲氨基
4-BrC ₆ H ₄ —	4-bromophenyl	4-溴苯基	(CH ₃) ₂ C<	1-methylethane-1,1-diyl	1-甲基乙-1,1-二基
CH ₃ (CH ₂) ₃ O—	butoxy	丁氧基	CH ₂ =C(CH ₃)—	1-methylethenyl	1-甲基乙烯基
CH ₃ (CH ₂) ₂ CH ₂ —	butyl	丁基	(CH ₃) ₂ CH—	1-methylethyl (isopropyl)	1-甲基乙基(异丙基)
HOOC—	carboxy	羧基	(CH ₃) ₂ C=	1-methylethylidene	1-甲基乙亚基
HOOCCH ₂ —	carboxymethyl	羧甲基	(CH ₃) ₂ CHO—	1-methylethylloxy	1-甲基乙氧基(异丙氧基)
Cl—	chloro	氯	CH ₂ =	methylidene	甲亚基
ClCO—	chlorocarbonyl	氯甲酰基	HC≡	methylidyne	甲次基
ClCH ₂ —	chloromethyl	氯甲基	CH ₃ CH ₂ CH(CH ₃)—	1-methylpropyl	1-甲基丙基
NC—	ciano	氰基	(CH ₃) ₂ CHCH ₂ —	2-methylpropyl	2-甲基丙基
	cyclobutyl	环丁基	CH ₃ S—	methylsulfanyl	甲硫基
	cyclohexyl	环己基		naphthalen-1-yl	萘-1-基
	cyclopentyl	环戊基		naphthalen-2-yl	萘-2-基
	cyclopropyl	环丙基	O ₂ N—	nitro	硝基
(CH ₃) ₂ N—	dimethylamino	二甲氨基	ON—	nitroso	亚硝基
(CH ₃) ₃ CO—	1,1-dimethylethoxy (<i>t</i> -butoxy)	1,1-二甲基乙氧基 (叔丁氧基)	O=	oxo	氧亚基
(CH ₃) ₃ COCO—	1,1-dimethylethoxycarbonyl (<i>t</i> -butoxycarbonyl)	1,1-二甲基乙氧甲酰基 (叔丁氧羰基)	PhO—	phenoxy	苯氧基
(CH ₃) ₃ C—	1,1-dimethylethyl(<i>tert</i> -butyl)	1,1-二甲基乙基(叔丁基)		phenyl	苯基
—CH ₂ CH ₂ —	ethane-1,2-diyl	乙-1,2-二基	PhNH—	phenylamino	苯氨基
CH ₃ CO—	ethanoyl (acetyl)	乙酰基	PhN=N—	phenylazo	苯偶氮基
CH ₃ CONH—	ethanoylamino	乙酰氨基	PhCH ₂ O—	phenylmethoxy	苯甲氧基
CH ₃ COO—	ethanoyloxy (acetoxy)	乙酰氧基	PhCH ₂ OCO—	phenylmethoxycarbonyl	苯甲氧甲酰基
CH ₂ =CH—	ethenyl (vinyl)	乙烯基		phenylmethyl (benzyl)	苯甲基(苄基)
CH ₃ CH ₂ O—	ethoxy	乙氧基		phenylmethylidene	苯甲亚基
CH ₃ CH ₂ OCO—	ethoxycarbonyl	乙氧甲酰基	CH ₂ CH ₂ CO—	propanoyl	丙酰基
C ₂ H ₅ OCOCH ₂ —	ethoxycarbonylmethyl	乙氧甲酰甲基	CH ₂ =CHCH ₂ O—	prop-2-enoxy (alloy)	丙-2-烯氧基(烯丙氧基)
CH ₃ CH ₂ —	ethyl	乙基	CH ₃ CH=CH—	prop-1-enyl	丙-1-烯基
CH ₃ CH=	ethylidene	乙亚基	CH ₂ =CHCH ₂ —	prop-2-enyl(allyl)	丙-2-烯基(烯丙基)
CH≡C—	ethynyl	乙炔基	CH ₃ CH ₂ CH ₂ —	propyl	丙基
F—	fluoro	氟		pyridin-4-yl	吡啶-4-基
	furan-2-yl	呋喃-2-基	HS—	sulfanyl	巯基
HO—	hydroxy	羟基	F ₃ C—	trifluoromethyl	三氟甲基
HOCH ₂ CH ₂ —	2-hydroxyethyl	2-羟基乙基	(CH ₃) ₃ SiO—	trimethylsiloxy	三甲硅氧基
HOCH ₂ —	hydroxymethyl	羟甲基	(CH ₃) ₃ Si—	trimethylsilyl	三甲硅基

2.3.2 取代基碳骨架编号

如果碳骨架没有特定编号, 取代基的基碳原子编号为“1”, 且“1”一般省略。如“3-甲基丁基”不必叫“3-甲基丁-1-基”; “丁基负离子”不必叫“丁基-1-负离子”。但是杂环、碳环(稠环、桥环和螺环)骨架有特定编号时, 必须按特定编号原则对取代基碳骨架进行编号, 然后标出基碳原子编号, 如“吡啶-2-基”“萘-1-基”等。

2.3.3 不建议用叉基和爪基

新的命名原则的宗旨是尽量保持中英文一致, 所以建议把“diyl”和“triyl”分别直译为“二基”和“三基”, 这更易于初学者掌握。《2017》将上述两类取代基很形象地称为“叉基”和“爪基”, 但是当遇到“tetrayl(四基)”或“pentayl(五基)”时, 并无合适的意译中文词, 若分别将其称成“蹄基”和“手基”等名称就太牵强, 因此建议在本科教材的系统命名中不采用“叉基”和“爪基”; “亚基”和“次基”两个名称不存在争议。

2.3.4 甲酰基相关基团

羧酸衍生物中的 $-\text{COCl}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 和 $-\text{COOR}$ 等基团, 都相当于甲酰基中的H分别被 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、和 $-\text{OR}$ 取代, 因此尽管其英文名分别为: chlorocarbonyl、aminocarbonyl (carbamoyl)、alkoxycarbonyl, 中文系统命名应该分别叫“氯甲酰基”“氨甲酰基”和“烃氧甲酰基”为妥。

2.3.5 烃氧基的命名

“烃氧基”相当于“烃基氧基”的简称, 因此建议其英文名称也采用普遍使用的简称形式, 如“甲氧基(methoxy)”“苯氧基(phenoxy)”, 不用“甲基氧基(methyloxy)”“苯基氧基(phenyloxy)”。有机化学教材中常见取代基的英文和中文系统名称按字母顺序列于表2。

3 结语

为了让学生更好地掌握取代基的字母顺序排列, 建议在讲授中文命名时同时给出英文命名。随着我国化学学科在世界范围内的影响逐步提高, 在保证有利于国际交流的前提下, 我们也倡导提升学科自信, 保留并发扬中文命名法的一些优点, 既做好“洋为中用”, 又发展“中为洋用”。由于篇幅有限, 官能团、母体化合物的命名及各类化合物命名举例在下一篇文章中解读。

参 考 文 献

- [1] 中国化学会有机化合物命名审定委员会. 有机化合物命名原则-2017. 北京: 科学出版社, 2018.
- [2] Panko, R.; Powell, W. H.; Richer, J. C. *A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (Recommendations 1993)*; Blackwell: Oxford, 1993.
- [3] Favre, H. A.; Powell, W. H. *Nomenclature of Organic Chemistry-IUPAC Recommendations and Preferred Names 2013*; The Royal Society of Chemistry: Cambridge, 2014.
- [4] 刘强, 史玲, 刘志刚, 蔡双莲. 大学化学, **2018**, 33 (5), 44.
- [5] 王朝霞, 罗千福, 窦清玉, 胡习乐. 化学教育(中英文), **2018**, 39 (22), 16.
- [6] 赵淑杰, 李明堂, 朱鹤, 洪波, 刘文丛. 大学化学, **2019**, 34 (6), 66.
- [7] 赵温涛, 郑艳, 王光伟, 马宁, 黄跟平. 有机化学. 第6版. 北京: 高等教育出版社, 2019.
- [8] Carey, F. A.; Giuliano, R. M. *Organic Chemistry*, 10th ed.; McGraw-Hill: New York, 2017.
- [9] Solomons, T. W. G.; Fryhle, C. B.; Snyder, S. A. *Organic Chemistry*, 12th ed.; John Wiley & Sons, Inc.: Hoboken, 2016.
- [10] Wade, L. G.; Simek, J. W. *Organic Chemistry*, 9th ed.; Pearson Education, Inc.: Glenview, 2016.
- [11] Vollhardt, P.; Schore, N. *Organic Chemistry: Structure and Function*, 8th ed.; W. H. Freeman and Company: New York, 2018.
- [12] Brown, W. H.; Iverson, B. L.; Anslyn, E. V.; Foote, C. S. *Organic Chemistry*, 8th ed.; Cengage Learning: Boston, 2018.
- [13] Bruice, P. Y. *Organic Chemistry*, 8th ed.; Pearson Education, Inc.: New Jersey, 2016.