

全国科学技术名词审定委员会 中国化学会

化学名词审定委员会

有机化合物命名审定委员会

有机化合物命名原则

2010 年推荐版

(第五稿 (5.1))

目录

第 1 章 有机化合物名称构词概要 (Conventions in Nomenclature of Organic Compounds)

- 1.1. 构词基本形式
- 1.2. 中文有机化合物名称中的连缀字和前、后缀字
- 1.3. 有机化合物名称用数字和符号
- 1.4. 有机化合物名称构词中的基本术语

第 2 章 有机化合物命名通则 (General Principles of Organic Nomenclature)

- 2.1. 成键数 (Bonding number)
- 2.2. 命名操作方法 (Nomenclature operation)
- 2.3. 额外氢的标注 (Indicated hydrogen)

第 3 章 母体氢化物以及由此形成的取代基 (Parent Hydrides and Their Derived Substituent Groups)

- 3.1. 有机化合物中的基元氢化物
- 3.2. 无环多核氢化物
- 3.3. 单环氢化物
- 3.4. 俗名和半系统命名的多环母体氢化物
- 3.5. 并(稠)环(多环)母体氢化物
- 3.6. 桥环(多环)母体氢化物
- 3.7. 螺环(多环)母体氢化物
- 3.8. 联环(Ring assemblies)母体氢化物
- 3.9. 蕃(Phanes)母体氢化物
- 3.10. 天然产物母体氢化物
- 3.11. 由母体氢化物衍生的取代基命名

第 4 章 特性基团(官能(基)团) (Characteristic (Functional) Groups)

- 4.1. 不饱和基团 (Unsaturation)
- 4.2. 特性基团 (Specification of characteristic groups)
- 4.3. 官能性母体化合物和衍生的取代基 (functional parent compounds and derived

substituent group)

4.4. 官能团置换

第5章 命名实施导引 (Guide to Name Construction)

5.1. 命名通则

5.2. 命名时用作后缀特性基团 (主体基团) 的确定

5.3. 命名时用作词根的母体氢化物的确定

5.4. 命名化合物中原子和基团位次的编号

5.5. 命名化合物中前缀排列顺序

第6章 各类化合物的命名 (Application to Specific Classes of Compounds)

6.1. 卤素、硝基、亚硝基、偶氮、重氮、叠氮化合物 (Halogen, nitro, nitroso, azo, diazo and azido compounds)

6.2. 胺和亚胺 (Amines and imines)

6.3. 羟基化合物及其衍生物、类似物 (Hydroxy compounds, their derivatives and analogues)

6.4. 醛、酮及其衍生物、类似物 (Aldehydes, ketones, their derivatives and analogues)

6.5. 酸及其相关的特性基团 (Acids and related characteristic groups)

6.6. 14~16 族元素有机化合物和金属有机化合物 (Organic compounds of the Group 14~16 and organometallic compounds)

6.7. 自由基和离子 (Radicals and ions)

第7章 立体化学 (Stereochemical Specification)

7.1. 导言

7.2. 立体化学中三维结构的构型图像表达方式

7.3. 手性化合物的构型表示法

7.4. 双键类异构体标识

7.5. 环状化合物异构体标识

第8章 天然产物 (Natural Products)

8.1. 生物碱 (alkaloids)

8.2. 萜类 (terpenes)

8.3. 甾体 (steroids)

8.4. 糖 (糖) (carbohydrates)

8.5. 氨基酸和多肽 (Amino acids and peptides)

8.6. 核苷和核苷酸 (Nucleosides and Nucleotides)

8.7. 类脂 (Lipids)

第 9 章 同位素丰度改变化合物 (Isotopically Modified Compounds)

9.1 符号和定义

9.2 同位素取代的化合物

9.3 同位素标记的化合物

引言

科学技术名词是科学技术得以描述、记录传播和交流的基础和载体。而对于主要从事化合物分子研究的化学学科来讲，除了需要一般的化学术语之外，还必须对迄今已超过数以千万计的，而且还在与日俱增的化合物分子给予各自的名称，更为重要的是从这样的名称上应该显示出与化合物结构间清晰的或含蓄的关系，这就要求对它们建立起一科学的、系统的命名规则。对有机化合物的命名，国际纯化学和应用化学联合会(IUPAC)有专门的委员会，提出了《有机化学命名法》(IUPAC Nomenclature of Organic Chemistry)，而且还不断在修订和补充，已经形成了一个长期处理命名问题的运行机制，这一命名体系因而也成为全球有机化学界最广泛使用的体系。其他方面也还有一些命名方法，如美国化学会有他们因化学文摘索引需要而建立的 CAS 命名系统，德国也有他们从 Beilstein 大全发展起来的命名法，但他们的基本体系与 IUPAC 的差别不大。

我国化学界过去也曾对中文的化合物系统命名原则的制定给予极大的重视，1978 年百废待兴之际，中国化学会专门成立了“有机化学名词小组”针对 1960 年《有机化学物质的系统命名原则》进行增补和修订，1980 年发布了《有机化学命名原则》(1980)，1983 年审定后正式出版^[1]。但是此后 30 年间，有机化学学科又有新的飞跃发展，再由于《有机化学命名原则》(1980)在当时也是一份较简洁的版本，因此确实已远不能适应当今有机化学学科发展的需要，也给中文有机化学的信息交流、教学带来诸多问题。为此全国科技名词委和中国化学会组建的第二届化学名词审定委员会有机化学学科组，在审定名词后，开始探索《有机化学命名原则》(1980)的更新修订工作。

考虑到 1983 年出版的“有机化学命名原则”(1980)制订时，虽然参考了国际纯化学和应用化学联合会(IUPAC)有机化学命名委员会 1979 年发布的有机化学命名蓝皮书^[2]，但是较为简单，一些当时国际上命名时采用的概念和提法也还未能提及。“有机化学命名原则”(1980)为命名中的一些中文字用法作了规定，但有些提法还有待修正或明确，还需补充一些中文命名中需要的连缀用字。因此这次修订的基本设想是应与当前国际命名规则在基本原则上一致，在内容上能大致涵盖 IUPAC 1979 年发布的有机化学命名蓝皮书，1993 年出版的命名指南^[3]和迄今在其网站上正式发布的有关有机化合物命名的建议^[4]，同时也适当参考 IUPAC 2004 年在其网站上公布的有机化合物首选命名建议(预览稿)，后也参考了该建议 10 年后以新一版蓝皮书的名义由英国皇家化学会正式出版的“Nomenclature of Organic Chemistry – IUPAC Recommendations and

Preferred Names 2013”^[5]；在形式上是符合中文构词的习惯，而且又易于与英文相互转换，便于国际交流；对于 1980 版中已作的规定、采用的中文译名和用字尽量少作改动，但对一些不够确切的规则和用字还必须加以仔细修订。

此次修订主要参考了 IUPAC 1993 年建议的命名指南，在此基础上进行了增补，尤其是对多环母体氢化物部份作了较大的扩充，还增加了我们 1980 版中已有的天然产物部份，并增加了内容。由于《原则》不涉及有机化学的其它术语，因此也参照 IUPAC 1993 年建议的名称，改称《有机化合物命名原则》—2010 年建议。IUPAC 80 年代以后在有机化合物命名规则的编排和叙述上有一些较大的改变，主要的有以母体氢化物（Parent hydride）的名称统一处理碳氢化物和其他杂原子氢化物的命名，以及以特性基团（Characteristic group）代替官能团（Functional group）。因此在这次中文命名的修订中，也作了相应的改动，但特性基团与官能团的含义差别不大，而有机化学界也已习惯官能团这一名称，故仍保留同时使用。

由于中文有机化合物名称中组合各结构组成名称时，需要采用各种连缀字来表达它们间的相互关系，此点是不同于英文中以变换字母，尤其是元音即可表达的构词方法。此次修订对 1980 版相应的章节作了较多的更动，不采用该版在有机化合物名词中使用语法中‘介词’或‘连缀词’的说法，而代之以构词学中的连缀字和前、后缀字，并作了较多的补充。对中文有机化合物名称中最常见的后缀字‘基’字则作了更多的补充，使各种取代基都能有明确的表达方式，并与英文名称中的后缀一一对应（参见第 3.11 节）。

中英文有机化合物命名相互转换时另一需要考虑的问题是前缀中取代基的排序。在 1980 年版命名原则中各取代基的名称系按其立体化学顺序规则中的大小在前缀中由小至大依次排列，但在 IUPAC 英文命名时则采用各取代基的名称按其英文字母顺序依次排列。由于取代基，尤其是多键取代基的大小有时难以按立体化学顺序规则确定，而且这一排列顺序有时还涉及命名中的位次编号问题，为此本次修订建议还是采用 IUPAC 的按其英文字母顺序的排列次序。类似的排序问题也存在于并环中多个拼合体时的排列和多螺环时各螺联环的排列，本次修订建议倾向于均采用 IUPAC 的方式。

对含杂原子的 3—10 员单环化合物除有俗名外，在英文中命名采用了扩展了的 Hantzsch-Widman 杂环命名系统，这一命名法在英文文献中获得了广泛采用。但对此命名系统 1980 版中未作相应处置，实际上中文文献中源于该命名系统表示含氮六员环的嘌呤，含氧饱和六员环的噁烷，以及含氮五员环的唑则已普遍应用，为此此次修订中除保

留上述三字外，其它的 3—10 员杂环作了对应于 Hantzsch-Widman 杂环命名系统的统一的规定，以天干丙至癸加(慢)环字样表示具最大累积双键数的 3—10 员环，再以杂原子名称加杂来进行命名，对饱和的环则后再加烷字表明；此外用噻表示硫杂，用噁代表氧杂也已较多采用，为此建议也可继续使用。（参见第 3.3.3.1 节）

‘蕃 (Phanes)’ 是 IUPAC 1998 年明确建议的一类复杂环系的类名，其中的 ‘环蕃’ (Cyclophane) 则早已在文献中出现并见于 IUPAC 1993 年建议的命名指南，我国化学名词审定委员会 1991 译为 ‘环芳’，一般也有译为 ‘环番’。蕃命名法是较为简单明了的命名方式，涉及的结构不仅只是环状的环境体系，更不是局限于中文 ‘环芳’ 所意味的芳环—链体系。因此第三章中增补了 3.9 节蕃母体氢化物。

其它一些中文用字上的修订，如鑰、麟、肿等的使用，酮在二种命名方法中的不同含义等请参见相关章节。

一些类型化合物的命名规则，如轮烷 (rotaxane)，球烯 (fullerene) 等，IUPAC 已有建议，因目前使用还较少，未收入这次修订稿。硼化合物的命名一般归属无机化合物命名规则中，故本次也未列入。

最后也许值得提一下的是 ‘命名原则’ 建议表达各别有机化合物结构的名称，但不一定是该结构的唯一名称，可能还有俗名、半俗名，也可能还有由不同命名途径得到的不同名称。IUPAC 2004 年在其网站上公布的有机化合物命名建议 (预览稿) 和 10 年后正式出版的蓝皮书中就提出了 IUPAC 首选名 (preferred IUPAC names, PIN) 和一般 IUPAC 名 (general IUPAC name) 的说法。但是任何一种方式命名的化合物名称所表示的结构应是唯一的。

本次 ‘有机化合物中文命名原则’ 的修订由第二届化学名词审定委员会有机化学学科组组织实施，也得到了国家自然科学基金会的支持。具体由 ‘命名原则’ 修订工作小组负责进行起草，初稿经由网上公告征求意见，并同时进行了多层次，不同范围的评审，根据意见修订一再评审一再修订后定稿。尽管经如此反复修订，但由于有机化合物的结构类型实在是十分繁杂，当还有不少命名的表达未曾妥善处置，为此竭诚欢迎批评指正。随着有机化学的发展，有机化合物的命名原则需要不断修订更新，涉及的范围也将进一步的扩展，建议在化学名词审定委员会组织下确立一个长期的运行机制，定期进行 ‘命名原则’ 的修订和补充。

参加《有机化合物命名原则》修订工作小组有：吴毓林、陈耀全、何煦昌、孙贺平、才磊；天然产物命名中生物碱命名由王锋鹏撰稿；萜类命名由穆青撰稿；糖(醣)类命名

由李中军、杜宇国等撰稿。赵春红参加了部份资料的编译工作，杨秀伟、姚子鹏、荣国斌对本建议稿提出了大量十分中肯的校订意见，谨此一并表示深切感谢。

《有机化合物命名原则》修订工作小组

参考文献

- [1] 中国化学会，有机化学命名原则（1980），科学出版社，北京，**1983**.
- [2] International Union of Pure and Applied Chemistry, Nomenclature of Organic Chemistry, Commission on Nomenclature of Organic Chemistry, Sections A, B, C, D, E, F and H. 1979 Edition. Pergamon Press, Oxford, 1070. 中译本：国际纯化学和应用化学联合会，有机化学命名法 A, B, C, D, E, F 和 H 部，1979，科学出版社，北京，**1987**.
- [3] A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds, Recommendations 1993, Blackwell, Oxford, **1993**.
- [4] a, IUPAC Recommendations 1998: Nomenclature of Fused and Bridged Fused Ring Systems, *Pure Appl. Chem.* **1998**, 70, 143.
- b, IUPAC Recommendations 1999: Extension and Revision of the von Baeyer System for naming Polycyclic compounds (including Bicyclic Compounds), *Pure Appl. Chem.* **1999**, 71, 513.
- c, IUPAC Recommendations 1999: Extension and Revision of the Nomenclature for Spiro Compounds, *Pure Appl. Chem.* **1999**, 71, 531.
- d, IUPAC Recommendations 1998: Phane Nomenclature, Part I: Phane Parent Names, *Pure Appl. Chem.* **1998**, 70, 1513.
- e, Corrections to A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (IUPAC Recommendations 1993), *Pure Appl. Chem.* **1999**, 71, 1327.
- f, IUPAC Recommendations 1999: Revised Section F: Natural Products and Related Compounds, *Pure Appl. Chem.* **1999**, 71, 587.
- g, IUPAC Recommendations 2002: Phane Nomenclature, Part II: Modification of the Degree of Hydrogenation and substitution Derivatives of Phane Parent Names, *Pure Appl. Chem.* **2002**, 74, 809.
- [5] Favre, H. A.; Powell, W. H. 'Preferred names in the nomenclature of organic compounds' (Provisional recommendations 2004), http://www.iupac.org/fileadmin/user_upload/publications/recommendations/CompleteDraft.pdf
Favre, H. A.; Powell, W. H. 'Nomenclature of Organic Chemistry – IUPAC Recommendations and Preferred Names 2013', Royal Society of Chemistry, **2014**.

第 1 章 有机化合物名称构词概要

1. 有机化合物名称构词概要

1.1. 构词基本形式 有机化合物名称从构词学来讲是由词根和词缀所构成，此词根也可以是多个词根结合在一起的复合式词根。词根是由化合物母体结构的名称，即母体氢化物（烃等）的名称和取代基以及特性基团（官能(基)团）的名称复合而成的名称。而词缀则包括中文中所需的连缀字、前、后缀字以及精确表征整个化合物结构所需而加在词根前、中、后的各种符号和数字。

1.2. 中文有机化合物名称中的连缀字和前、后缀字

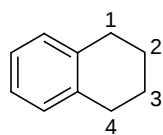
1.2.1. 中文有机化合物名称中的连缀字

中文有机化合物名称中常需采用一些特定的连缀字以表达他们各结构组成名称间的相互关系，此点是不同于英文中以变换字母，尤其是元音即可表达的构词方法。中文化合物名词中的基本连缀字有六个，即化、代（替）、杂、合、并、缩。

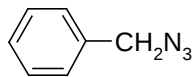
1.2.1.1. ‘化’

在用加合法（additive operation）命名化合物时，形式上为各结构组成相加而不失去任何原子或基团，在一些场合下化合物的名称可由各结构组成的名称中加连缀字‘化’而构成。通常‘化’字可以省略。

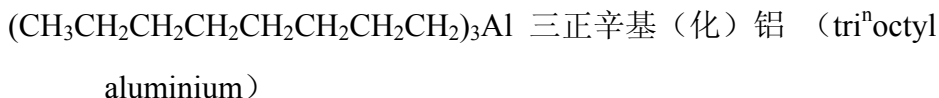
例：



1,2,3,4-四氢（化）萘（1,2,3,4-tetrahydronaphthalene）



苄基（化）叠氮（benzyl azide）



无机化合物命名时‘化’是最常用的连缀字，表达形成离子键，如氯化钠，氢氧化钾。在含离子键的有机化合物命名时‘化’也是最常用的连缀字。有机酸根形成的盐命名时‘根’和‘化’字均省略。

例：

CH_3MgBr 溴化甲基镁 (methyl magnesium bromide)

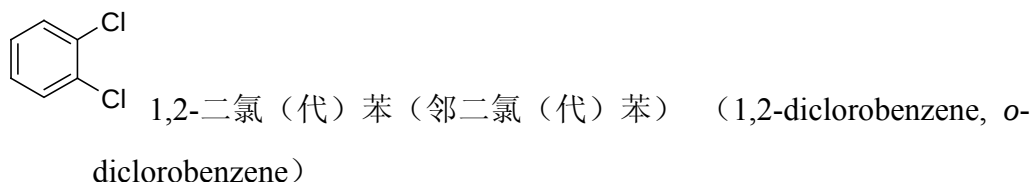
$\text{C}_{16}\text{H}_{33}(\text{CH}_3)_3\text{NH}_4\text{Cl}$ 氯化十六烷基三甲基铵 (cetyl trimethylammonium chloride)

CH_3COONa 乙酸 (根化) 钠 (sodium acetate)

1.2.1.2. ‘代’ (‘替’)

在用取代法 (substitutive operation) 命名化合物时，母体结构碳骨架上一个或多个氢为其它原子或基团取代而形成化合物的名称中，采用连缀字‘代’来构成。通常‘代’字可以省略。

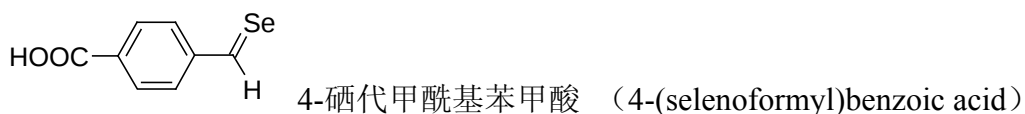
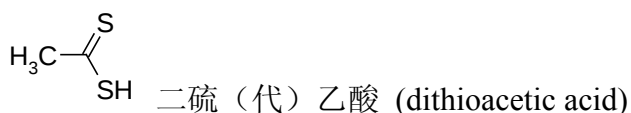
例：



$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NO}_2$ 硝基 (代) 乙烷 (nitroethane)

母体结构碳骨架上的氧亚基，氧叉基或羟基中氧为硫属元素所置换 (取代) 而形成化合物的名称中，采用连缀字‘代’来构成。有时‘代’字可以省略。如为其它原子或基团置换时则用连缀字‘替’来命名。

例：



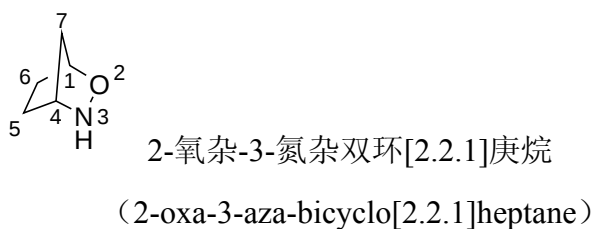
$\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_4-\text{C}(=\text{O})-\text{NH}_2$ 己酰胺 (hexanoamide) $\rightarrow \text{CH}_3-(\text{CH}_2)_4-\text{C}(=\text{NH})-\text{NH}_2$

己亚氨基替酰胺 (hexanimidamide)

1.2.1.3. ‘杂’

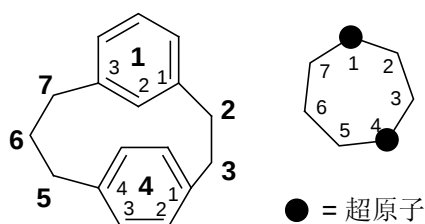
在用置换法 (replacement operation) 命名化合物时, 除已有俗名和按 Hantzsch-Widman 杂环命名系统命名的十员以下杂环外, 其它复杂的杂环化合物可视为相应的环烃母体结构, 在一定位置上的碳原子被杂原子置换而成。因此它们可以杂原子加连缀字‘杂’和母体结构的名称来命名, 环原子编号以母体环烃编号为准。

例:



在蕃命名时, 表示超原子的扩展体 (环状母体氢化物) 名后也采用加连缀字‘杂’的方法。

例:



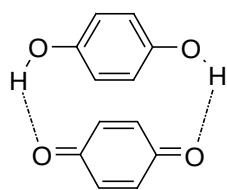
1(1,3),4(1,4)-二苯杂环七蕃 (1(1,3),4(1,4)-dibenzenacycloheptaphane)

1.2.1.4. ‘合’

连缀字‘合’用于分子间加合物的命名。加合法 (additive operation) 命名采用的这一个连缀字, 较多见于无机化合物的命名。有时‘合’字可以省略。

例:

(CF₃)₂CO·3H₂O 三水(合)六氟丙酮 (hexafluoroacetone trihydrate)

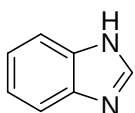


醌(合)氢醌 (quinhydrone, hydroquinone:benzoquinone 1:1 complex)

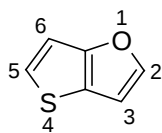
1.2.1.5. ‘并’

复杂多环体系中如包含共有二个相邻环原子的并(稠)环结构，则可用二边环系的名称加连缀字‘并’来命名。

例：



1H-苯并[d]咪唑 (1H-benzo[d]imidazole)

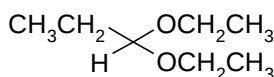


噻吩并[3,2-b]呋喃 (thieno[3,2-b]furan)

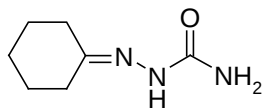
1.2.1.6. ‘缩’

相同或不同分子之间失水、醇、氨等小分子而形成的化合物，可以原分子的名称加连缀字‘缩’来命名。

例：



二乙醇缩丙醛，丙醛缩二乙醇 (propanal diethyl acetal)



环己酮缩氨基脲 (cyclohexanone semicarbazone)

1.2.2. 中文有机化合物名称中的前缀字

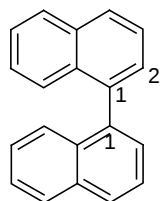
中文有机化合物名称中使用一些特定的前缀字来表明词根中母体结构的改变，有些前缀字有相对应的英文前缀。

1.2.2.1. ‘联’

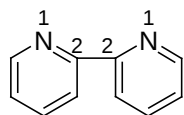
二个或二个以上的相同环结构以单键或双键直接相连的化合物，可以环结构基团的

名称加前缀‘联’来命名。

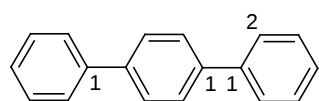
例：



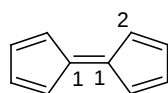
1,1'-(二)联萘(基) (1,1'-binaphthalene, 1,1'-binaphthyl)



2,2'-(二)联吡啶(基) (2,2'-bipyridine, 2,2'-bipyridyl)

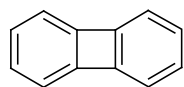


三联苯(基) (*p*-terphenyl)



1,1'-(二)联(环戊-2,4-二烯-1-亚基)

(1,1'-bi(cyclopentadienylidene))

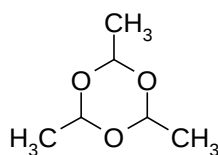


二联苯叉基 (biphenylene)

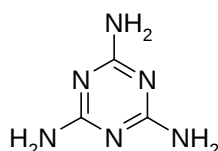
1.2.2.2. ‘聚’

相同或不相同的分子形成的聚合物，可以单体或链节的名称加前缀‘聚’来命名。主要见于高分子聚合物，少见于有机小分子。

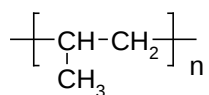
例：



三聚乙醛 (2,4,6-trimethyl-1,3,5-trioxane, paracetaldehyde)



三聚氰胺 (2,4,6-triamino-1,3,5-triazine, melamine)

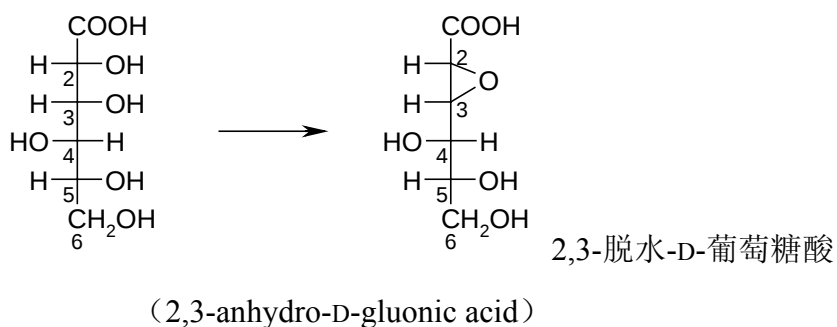
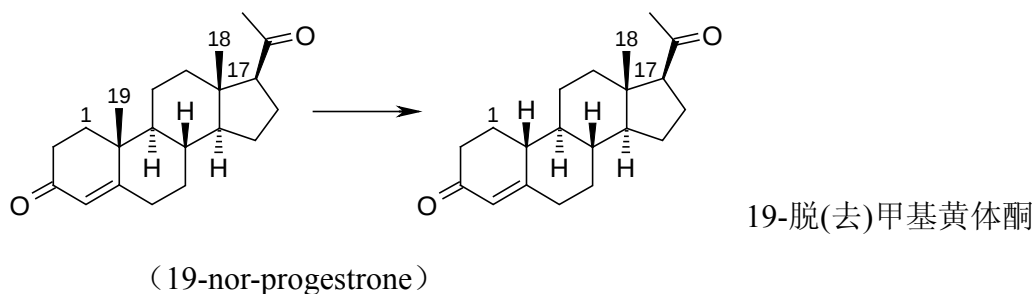
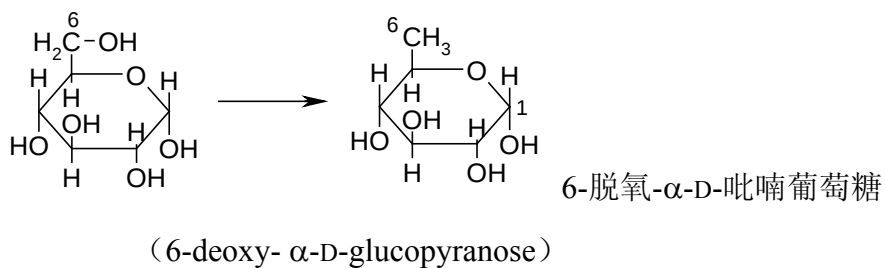


聚丙烯 (polypropylene)

1.2.2.3. ‘脱（去，失，降）’

用于表示母体结构中缺失某一基团或原子，相当于英文中的前缀 **de-**, **nor-**和脱水时的 **anhydro-**。

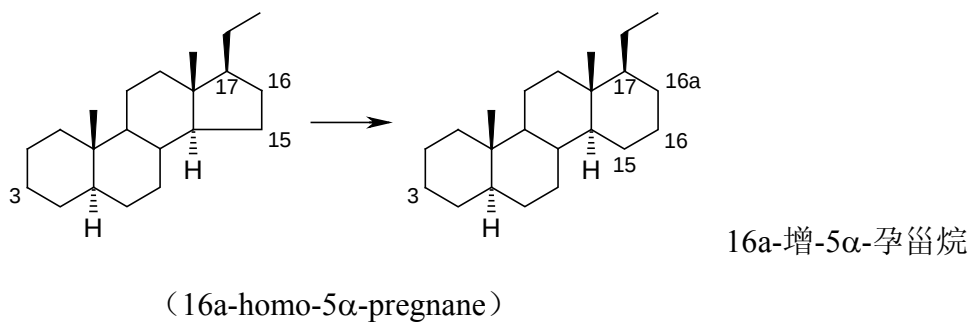
例：



1.2.2.4. ‘增（高，加，扩，升）’

用于表示环或非环母体结构中插入一甲叉基(-CH₂-)，相当于英文中的前缀 **homo-**。

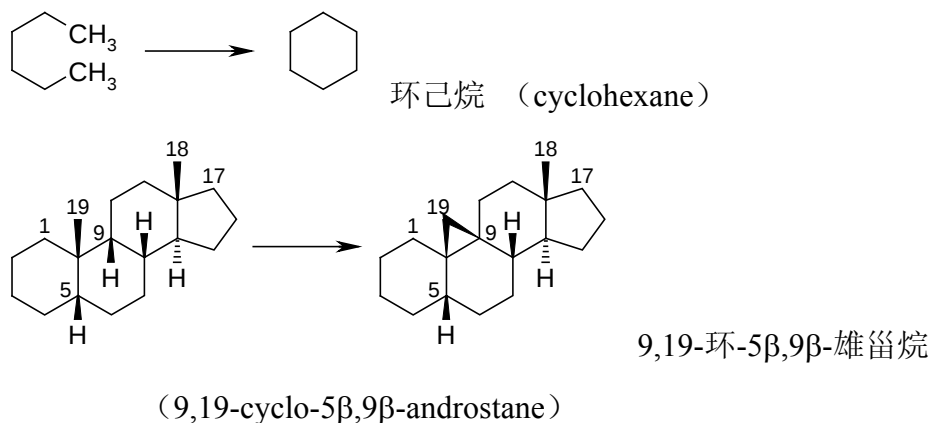
例：



1.2.2.5. ‘环’

母体结构中任二原子各失去一氢原子后成环，由此形成的化合物可以母体结构的名称加前缀‘环’来命名。前缀‘环’相当于英文中的前缀 *cyclo-*。

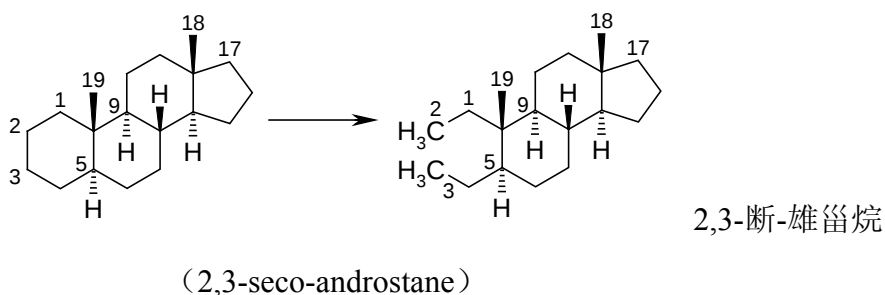
例：



1.2.2.6. ‘断’ (开)

成环的逆过程，即环断开后的二端各加上一氢原子，由此形成的化合物可以母体结构的名称加前缀‘断’来命名。前缀‘断’相当于英文中的前缀 *seco-*。

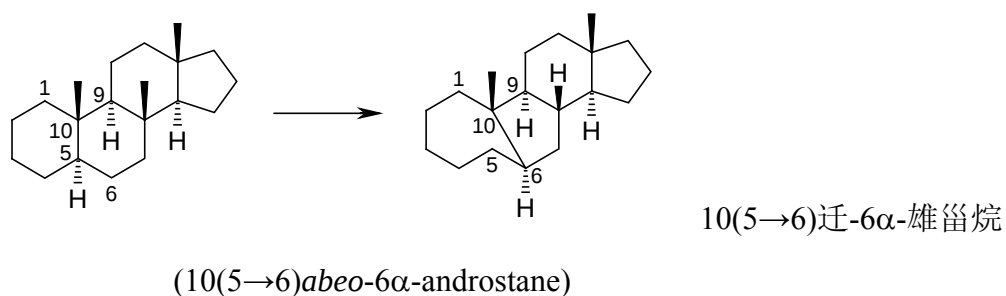
例：



1.2.2.7. ‘迁 (移)、逆’

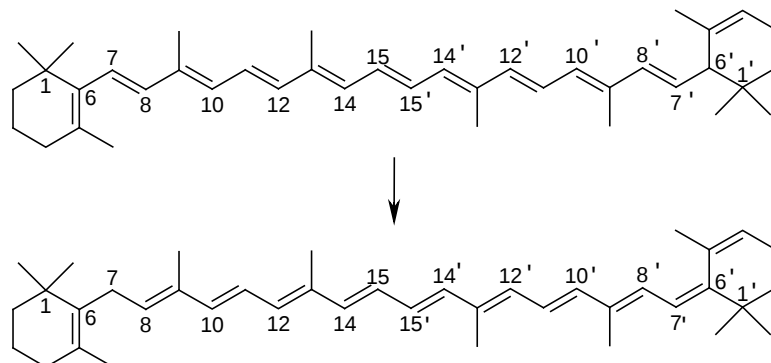
分子骨架上键迁移后形成的化合物可用母体结构的名称加前缀‘迁’来命名。前缀‘迁’相当于英文中的前缀 *abeo-*。

例：



前缀字‘逆’一般仅用于共轭双键发生重排后胡萝卜素类结构的命名，相当于英文中的前缀 *retro-*。

例：



β, ϵ -6',7-逆胡萝卜素 (β, ϵ -6',7-*retro*-carotene)

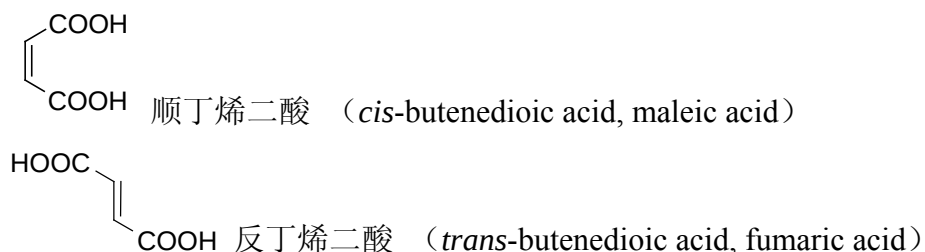
1.2.2.8. ‘正、异、新、仲、叔’

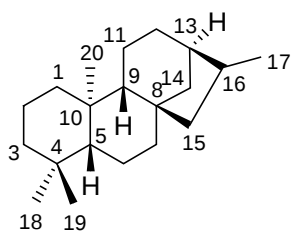
‘正、异、新、仲、叔’作为前缀用于描述不同的结构异构体，主要在半系统命名法区别命名链状化合物或天然产物的同分异构体时采用，相应于英文的‘normal, iso-, neo-, sec-, tert-, quater-’；在分子式中‘正、异、仲、叔’可用字母 n-, i-, s-, t-表示。‘异、新’用于支链烃的俗名见3.2.1.节；‘异、新、仲、叔’用于烃类取代基的俗名见3.11.节；‘仲、叔’在胺类化合物类名上的应用见 1.3.2.4.节。

1.2.2.9. ‘顺，反，（对）映’

‘顺，反，（对）映’作为前缀用于描述不同的构型异构体，相应于英文的‘cis, trans, enantio-’。

例：





(对) 映贝壳杉烷 (*ent*-kaurane)

1.2.2.10. ‘邻，间，对，迫’

‘邻，间，对，迫’ 作为前缀用于描述取代基在母体结构上的相对位置，相应于英文的 ‘*ortho, meta, para, peri*’ (‘邻，间，对’ 参见1.3.3.1节)，‘迫’ 位也称‘近’ 位表示萘环的1,8位或4,5位以及类似结构中的相对位置。

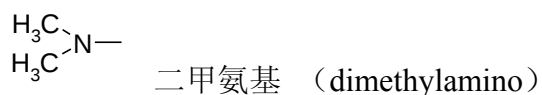
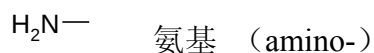
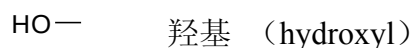
1.2.3. 中文有机化合物名称词根中的后缀字

有机化合物名称词根通常由母体氢化物(烃等)的名称和取代基以及官能(基)团的名称复合而成，而取代基以及官能(基)团的名称通常均加后缀‘基’，这是中文有机化合物名称中最常见的后缀字。

1.2.3.1. 基

分子某一结构单元通过单键与分子其余部分相连，这一结构单元通常以‘基’字为后缀来命名。这些结构单元包括相当于氢化物(烃等)形式上消除一个氢后形成的取代基和各种特性基团(官能(基)团)。

例：

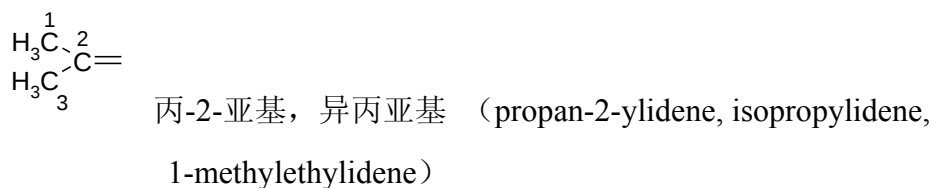
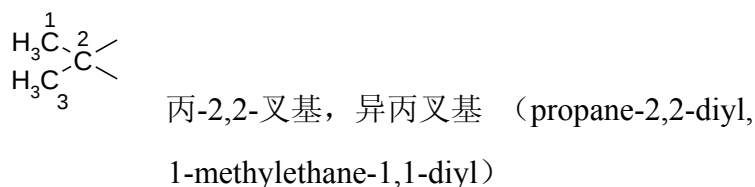
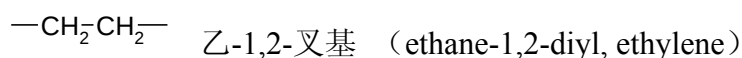
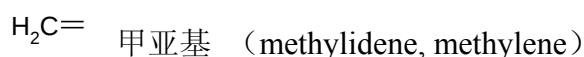
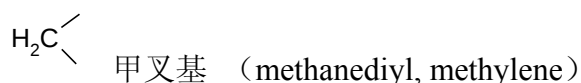


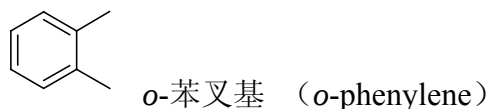
关于基命名中更详细的规则见第3.11节。

1.2.3.2. 叉基和亚基

分子某一结构单元通过二单键或一双键与分子其余部分相连，这一结构单元1980年版曾通称之为‘亚基’，现建议保留‘亚基’为通称外，再进一步分别以‘叉基’或‘亚基’字为后缀来区别命名。这些结构单元主要来自相当于氢化物（烃等）消除二个氢后形成的取代基，取代基以二个单键连接分子骨架的同一个原子时（即双键），该取代基称‘亚基’；取代基以二个单键分别连接分子骨架的二个原子时，该取代基则用‘叉基’作为更确切命名的后缀，此时相当于英文的后缀 -ylidene, -ylene 或-diyl。氨基消除一个氢后形成的基团，如以双键与分子其余部分相连可称氨亚基（imino-）；如以两个单键与分子其余部分相连可称氨叉(仲)基，但通常较少使用，而将此类化合物作为仲胺类化合物来命名。‘叉基’或‘亚基’在命名中是一不可分拆的词，但在习惯使用中，尤其是对小基团的命名时，有采用嵌入方式，如亚甲基，亚丙基，亚氨基等，在不致混淆时仍可保留使用，但建议尽量少用或不用。

例：

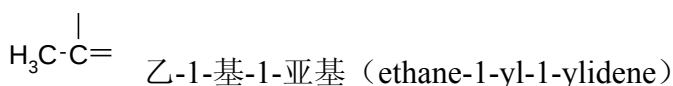
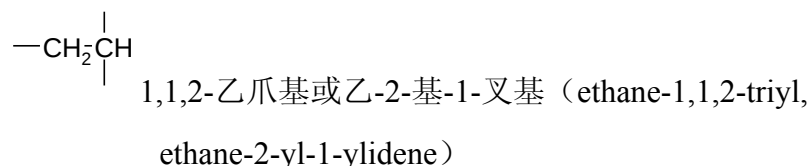
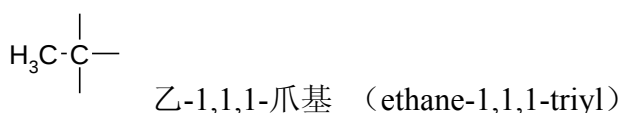
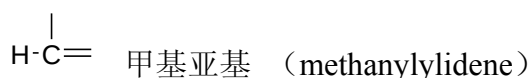
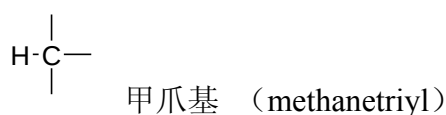


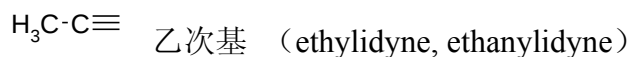


1.2.3.3. 爪基和次基

分子某一结构单元通过三单键，一单键和一双键或叁键与分子其余部分相连，这一结构单元1980年版曾通称之为‘次基’，现建议保留‘次基’为通称外，再进一步分别以‘爪基’，‘基亚基’或‘次基’为后缀来命名。这些结构单元主要来自相当于氢化物（烃等）消除三个氢后形成的取代基，这些连键可连于取代基骨架的同一个原子或不同的原子，对来自烃基并以叁键与分子其余部分相连的取代基则用‘次基’为后缀来命名，1980年版建议用‘炔基’，但易发生混淆。‘爪基’，‘基亚基’或‘次基’相当于英文的后缀-triyl, -ylidene 或 -yldyne。氨基消除二个氢后形成的基团，可称氨爪(叔)基，但通常较少使用，而将此类化合物作为叔胺类化合物来命名。‘爪基’或‘次基’在命名中是一不可分拆的词，但在习惯使用中，尤其是对小基团的命名时，有采用嵌入方式，如次甲基，次乙基等，在不致混淆时仍可保留使用，但建议尽量少用或不用。

例：

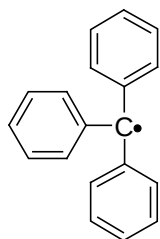




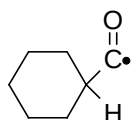
1.2.3.4. 自由基

对具有未配对电子的取代基和各种特性基团（官能（基）团）以加后缀‘自由基’来命名，相当于英文 (free) radical。

例：



三苯甲基自由基 (triphenylmethyl radical)

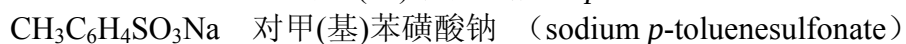
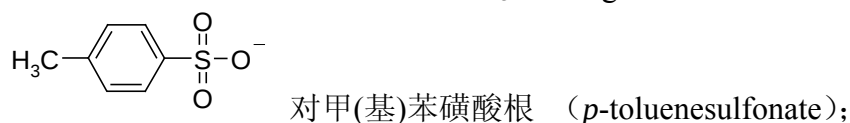


环己烷基羰基自由基 (cyclohexanecarbonyl radical)

1.2.3.5. 根

‘根’作为后缀用于命名分子结构中与其它组成以离子键相结合的部分，较多见于无机化合物，有机化合物中少见，如有机酸失去质子后的有机酸根，但在命名由此形成的盐时，‘根’字通常均省略。

例：

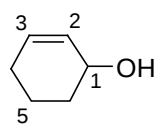


1.3. 化合物命名用数字和符号

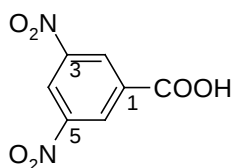
1.3.1. 阿拉伯数字

1、2、3、4、5 ……用于有机化合物母体结构的链或环编号，也用于表示取代基或特性基团在母体结构中的位次。在命名中，位次数字加在所表示的对象之前，多个位次数字时用逗号‘,’分开，（前）后加半字连接号‘-’。

例：



环己-2-烯-1-醇 (cyclohex-2-en-1-ol)



3,5-二硝基苯甲酸 (3,5-dinitrobenzoic acid)

螺、桥环化合物命名时，阿拉伯数字用于表示螺、桥节点间的原子数目，数字间用小圆点式的句号 ‘.’ 分开，详见 3.6，3.7 节。

1.3.2. 中文数字、天干和其它量词、顺序字

1.3.2.1. 中文数字

一、二、三 ……用于表示所命名化合物中相同原子，取代基或特性基团的个数，通常 ‘一’ 字省略。大致相当于英文中所采用的希腊文来的前缀： ‘mono-’, ‘di-’, ‘tri-’, ‘tetra-’ ‘penta-’ ……。

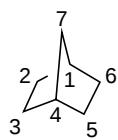
例：

CHClFCF₃ 1-氯-1,2,2,2-四氟乙烷 (1-chloro-1,2,2,2-tetrafluoroethane, HCFC-124)

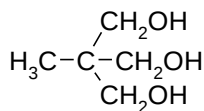
1.3.2.2. 单、双和大写中文数字

单、双、叁、肆 ……用于表示所命名桥环化合物的环数，多元酸的衍生物数等场合，以及化合物中复杂取代基或修饰过的特性基团的个数。大致相当于英文中所采用的源自拉丁文的前缀： ‘mono-’, ‘bi-’, ‘ter-’, ‘quarter-’; ‘bis-’, ‘tris-’, 和一般数字加 ‘kis-’ 而来的 ‘tetrakis-’ 等。 ‘单’ 字通常省略，仅用于多特性基团的化合物中，表达仅有某一基团被修饰。在实际应用中，如不致引起混淆时，双、叁、肆 ……也可改用小写的中文数字二、三、四 ……。

例：



双环[2.2.1]庚烷 (bicyclo[2.2.1]heptane)



1,1,1-叁(羟甲基)乙烷 (1,1,1-tris(hydroxymethyl)ethane)



1.3.2.3. 天干

天干甲、乙、丙、丁、戊、己、庚、辛、壬、癸用于表示十个碳（或硅、氮、硼等）原子以下的链或环的原子数，十一以上则仍用中文数字。

1.3.2.4. 伯、仲、叔、季

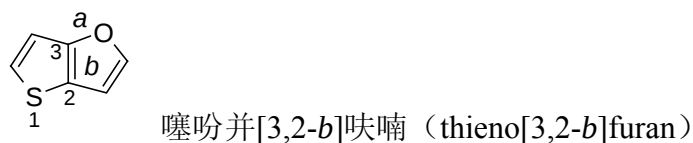
中文顺序字‘伯、仲、叔、季’用于氢化物一、二、三、四取代时的名称，如烃类化合物中的碳相应地称为伯碳、仲碳、叔碳和季碳；胺类化合物则相应地称为伯胺、仲胺、叔胺和季胺盐。‘伯、仲、叔、季’一般不出现在系统或半系统命名原则命名的名称中。‘伯、仲、叔、季’相应于英文的 primary, secondary, tertiary, quaternary。

1.3.3. 斜体拉丁字母和字节

1.3.3.1. 小写斜体拉丁字母

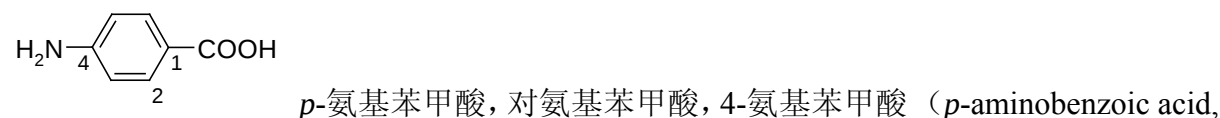
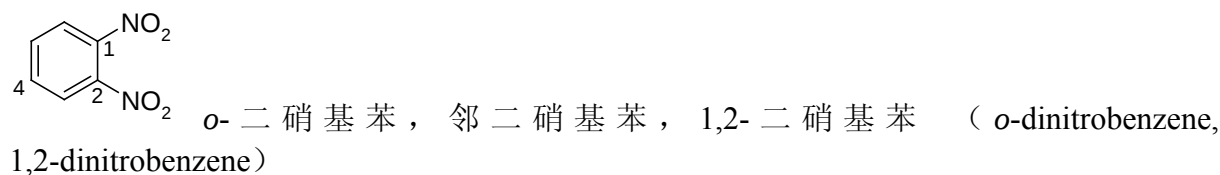
a, b, c, d用于并环化合物命名时，表示母体环中并环边的位置，详见 3.5.4.3 节。

例：



o, m, p 用于二取代苯衍生物取代基的相对位置，为 *ortho, meta, para* 的缩写，也可用中文邻，间，对代替。此三字符也可用于类似结构中表示位置之用，但建议优先考虑使用数字编号。

例：

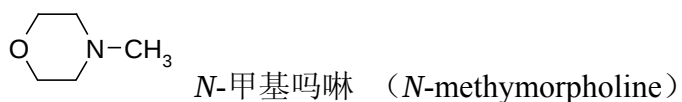


4-aminobenzoic acid)

1.3.3.2. 大写斜体元素符号

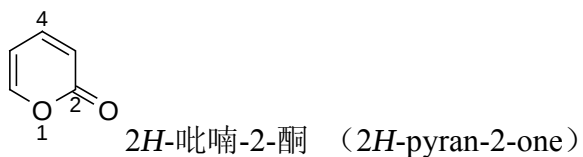
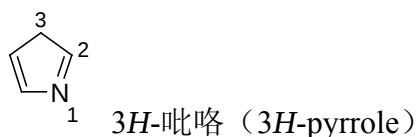
大写斜体元素符号 *O*-, *N*-, *P*-, *S*- 表示基团连接在这些元素上。

例:



大写斜体氢元素符号 *H*- 表示该位置上为氢或加氢。

例:



1.3.3.3. 其它斜体字母和字节

为标明化合物中某结构单元的立体化学状态而使用了一些斜体字节和字母。

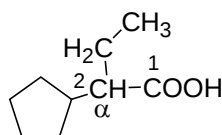
如: *Z*, *E* (表示顺反构型); *R*, *S* (表示绝对构型); *R**, *S**; *rel* (表示相对构型)。

r (表示参考基团), *c* (表示相对于参考基团为顺式), *t* (表示相对于参考基团为反式)。详见第 7 章

1.3.4. 希腊字母

α , β , γ ω 类似于阿拉伯数字用于有机化合物母体结构的链或环编号, 也用于表示取代基或特性基团在母体结构中的位次。但当用于醛、酮、酸和杂环等体系时较阿拉伯数字顺延一位。 ω 表示末端位。

例:

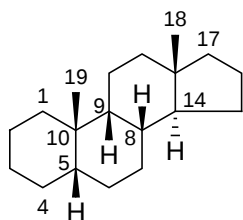


α -乙基环戊烷乙酸 (α -ethylcyclopentaneacetic acid)

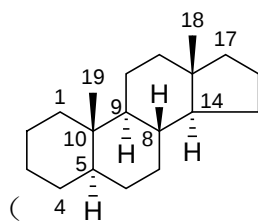
2-乙基环戊烷乙酸 (2-ethylcyclopentaneacetic acid)

α , β 在立体化学中, 尤其在天然产物的习惯命名时, 也用于表示取代基或特性基团在参考平面下或上的构型取向。

例:



5 β ,9 β -雄甾烷 (5 β ,9 β -androstane)



(雄甾烷 (androstane))

1.3.5. 标点符号

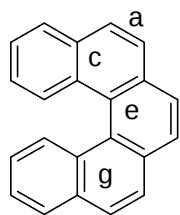
有机化合物名称中的标点符号对明确所命名的结构是极其重要的。为使名称紧凑、明晰建议采用中文半字的标点符号 (英文标点符号)。

1.3.5.1. 逗号

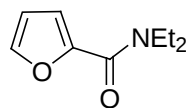
当命名的化合物名称中有多个表示位次的数字或表示并环边位的字母时, 中间用逗号分开。详见 3.5 节

例:

$\text{ClCH}_2\text{CH}_2\text{Cl}$ 1,2-二氯乙烷 (1,2-dichloroethane)



二苯并[c,g]菲 (dibenzo[c,g]phenanthrene)



N,N-二乙基呋喃-2-甲酰胺, *N,N*-二乙基糠酰胺

(*N,N*-diethyl-2-furamide)

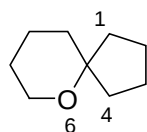
1.3.5.2. 句号（小圆点）

桥环或螺环化合物中表示桥原子数的数字间用小圆点式的句号分开。详见 3.5, 3.6 节

例：



双环[3.2.1]辛烷 (bicyclo[3.2.1]octane)

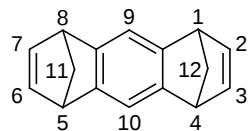


6-氧杂螺[4.5]癸烷 (6-oxaspiro[4.5]decane)

1.3.5.3. 冒号与分号

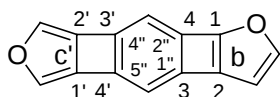
当命名的化合物名称中有多组表示位次的数字或表示并环边位的字母时，组间用冒号分开。当需进一步分组时可使用分号。详见 3.5.3.4, 3.5.3.7 节

例：



1,4,5,8-四氢-1,4:5,8-二甲桥蒽

(1,4,5,8-tetrahydro-1,4:5,8-dimethanoanthracene)



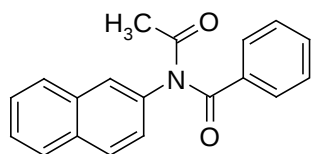
苯并[1'',2'':3,4;4'',5'':3',4']二丁(熯)环并[1,2-*b*:1',2'-*c*']二呋喃

(benzo[1'',2'':3,4;4'',5'':3',4']dicyclobuta[1,2-*b*:1',2'-*c*']difuran)

1.3.5.4. 连接号

半字连接号（-）（英文连接号）用于数字、西文字母或字节与中文名称间的连接。中文名称之间如有必要连接时则用全字连接号（—）。

例：



N-乙酰基-*N*-(2-萘基)苯甲酰胺

(*N*-acetyl-*N*-(2-naphthyl)benzamide)

$(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O} \cdot \text{BF}_3$ 三氟化硼-二乙醚(络合物) (boran trifluoride diethyl etherate)

1.3.5.5. 括号

1.3.5.5.1. 圆括号(小括号)

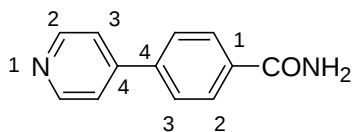
(i) 圆括号用于表明复杂取代基或修饰过的特性基团, 放在中文数字之后。

例:

$(\text{HO}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{O})_2\text{CH}-\text{COOH}$ 双(2-羟基乙氧基)乙酸 (bis(2-hydroxyethoxy)acetic acid)

(ii) 圆括号也可用于有可能引起混淆的简单的取代基。

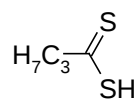
例:



4-(吡啶-4-基)苯甲酰胺 (4-(4-pyridyl)benzamide)

(iii) 圆括号用以进一步明确所命名化合物的结构特征, 但此时也可不用括号。

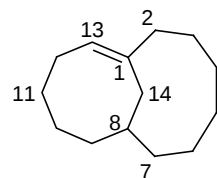
例:



(二硫代)丁酸 (butane(dithioic) acid)

(iv) 命名含双键的化合物时, 当从双键第一位次计可能存在不是唯一的第二位次, 需用圆括号标明此时的第二位次。

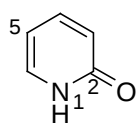
例:



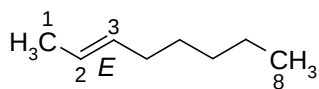
双环[6.5.1]十四碳-1(13)-烯 (bicyclo[6.5.1]tetradec-1(13)-ene)

(v) 圆括号也用于加氢及其位次, 立体化学中构型的标记等。

例:



吡啶-2(1*H*)-酮 (pyridine-2(1*H*)-one)

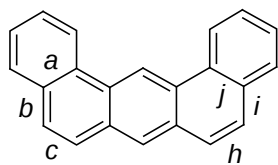


(*E*)-辛-2-烯 ((*E*)-oct-2-ene)

1.3.5.5.2. 方括号（中括号）

(i) 桥环、螺环化合物中表示桥原子数的数字和并环化合物中表示并合边的字母使用方括号。

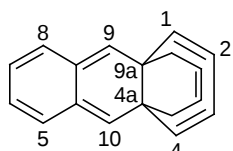
例：



二苯并[*a,j*]蒽 (dibenzo[*a,j*]anthracene)

(ii) 并环化合物命名时，用方括号标出其一些结构特征，如桥上的双键，环上杂原子的位次等。

例：



4a,9a-丁[2]烯桥蒽 (4a,9a-but[2]enoanthracene)

(iii) 化合物命名中复杂取代基或修饰过的特性基团用圆括号表标明后，需进一步表示时则采用方括号。

例：

溴化[2-(乙氧羰基)乙基]三甲基铵 ([2-(ethoxycarbonyl)ethyl]trimethylammonium bromide)

(iv) 方括号也用于标明同位素化合物。

例：

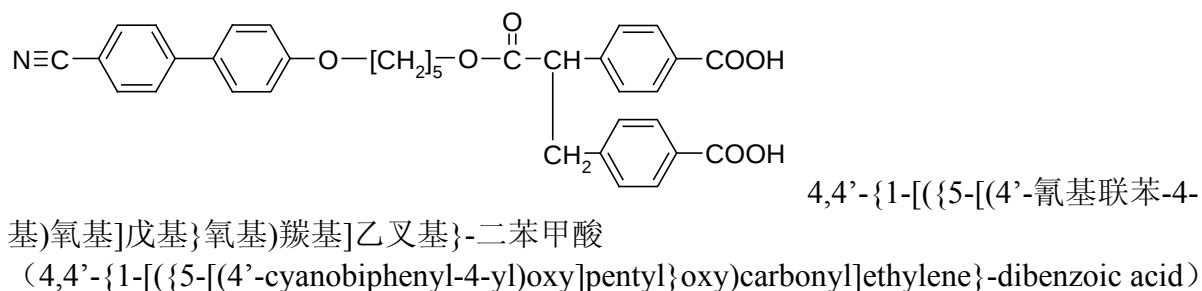
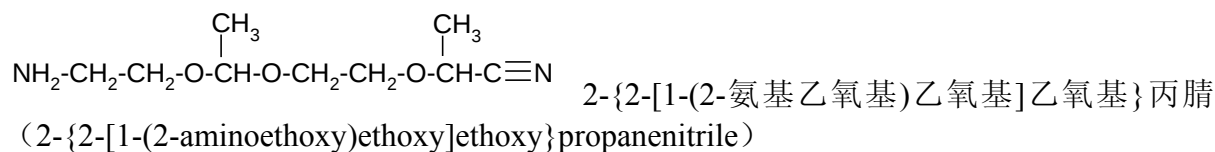
[¹³C]甲烷 ([¹³C]methane)

1.3.5.5.3. 大括号

化合物命名中当已采用圆括号、方括号后，再进一步则采用大括号。当有需要时，

可反复使用圆括号、方括号再大括号这一顺序。

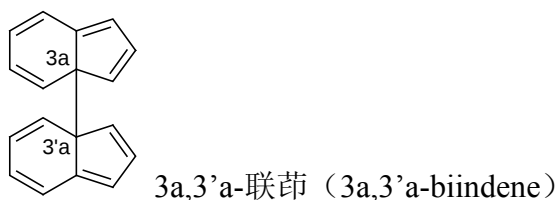
例：



1.3.6. 撇 (primes) (')

单撇 (')，双撇 (") 和三撇 (") 等用于斜体氮元素符号后以区分酰肼等多氮结构中不同位置的氮原子；用于阿拉伯数字后以表示多重键，螺环，联环等中不同结构单元的位次编号（注意：带有字母的位次加撇时，撇加在数字后，字母前，如 4'a）。

例：



1.4. 有机化合物名称构词中的基本术语

一些术语在有机化学命名原则中有其特殊的含义，以下是在本文中所使用的主要术语。

1.4.1. 母体结构 (parent structures)

1.4.1.1. 母体氢化物 (parent hydride)

母体氢化物指无分叉的无环或环状结构以及有半系统命名或俗名的无环或有环结构，而其上仅连接有氢原子的化合物。

例：

甲烷 (methane); 环己烷 (cyclohexane); 苯乙烯 (styrene); 吡啶 (pyridine); H_2PPH_2 二磷烷 (diphosphane, diphosphine)。

1.4.1.2. 官能性母体 (functional parent)

此类结构中存在有一个或多个特性基团，在其至少一个的骨架原子上或特性基团上连接有一个或多个氢原子，或结构中至少有一个特性基团能形成至少一种官能团性的修饰。

例：

乙酸 (acetic acid); 苯胺 (aniline); 膦酸 (phosphonic acid)。

用母体氢化物加特性基团名称作后缀所表示的结构，如环己醇不能称为官能性母体，而只能认为是官能化的母体氢化物 (functionalized parent hydride)。

1.4.2. 基团 (groups)

1.4.2.1. 取代原子或取代基团 (substituent atom or group)

取代了母体结构或特性基团中一个或多个氢原子的原子或基团，但不包括取代硫属原子上氢原子的原子或基团。

1.4.2.2. 特性基团 (characteristic group)

特性基团包括：加在母体氢化物的单个杂原子，如 $-\text{Cl}$ 和 $=\text{O}$ ；带一个或多个氢或其它杂原子的杂原子，如 $-\text{NH}_2$, $-\text{OH}$, $-\text{SO}_3\text{H}$, $-\text{PO}_3\text{H}$, 和 $-\text{IO}_2$ ；含有一个碳原子的杂原子基团，如 $-\text{CHO}$, $-\text{CN}$, $-\text{COOH}$, 和 $-\text{NCO}$ 。更多的特性基团见第 4 章。

在以往有机化学的术语中相应于‘特性基团’的术语为‘官能团’ (functional group)，官能团在物理有机化学中的定义为：‘有机化合物通常是由一相对较不活泼的骨架如饱和的碳链和若干官能团所组成，官能团可以是一个原子或一组原子，当它们存在于不同的化合物中时，仍能显示出相类似的化学性质。有机化合物类别的物理和化学特性取决于它所具有的官能团。’ ‘官能团’一词在某些场合下难于认定，因此 IUPAC 在有机化合物命名时改而使用特性基团 (characteristic group)，但实际上仍将‘functional group’一词以同义词形式加括号置于‘characteristic group’之后。为此中文‘官能团’一词也作类似处理，在不致引起误解的情况下，或也可作为特性基团的俗称使用。

1.4.2.3. 主体基团 (principal group)

用于该结构化合物类名命名的特性基团。

1.4.3. 有机化合物名称类术语

1.4.3.1. 俗名

名称中完全不出现系统命名中采用的字和字节。

例：

尿素 (urea)。

众多天然产物的名称，如樟脑 (camphor)。

1.4.3.2. 半系统命名名或半俗名

名称中至少包含有部分系统命名中采用的字和字节。此时中英文的名称类型不一定相同。

例：

均为半俗名： 5 α -胆甾烷 (烷) —— 5 α -cholestane(ane)；醋酸 (酸) —— acetic acid (acid)。

中文为半俗名： 鞘氨醇 (氨醇) —— sphingosine

英文为半俗名： 甘油 —— glycerol(ol)；龙脑，冰片 —— borneol(ol)。

英文为半俗名，中文为系统名： 苯乙烯 —— styrene(ene)；丙酮 —— acetone(one)。

1.4.3.3. IUPAC 系统命名名

IUPAC 系统命名名系指按国际纯化学和应用化学联合会 (IUPAC) 有机化学命名委员会提出的有机化学命名原则所给出的名称。在 IUPAC-2013 的蓝皮书中又提出了当一个化合物可以有多个系统名时，规定其中之一为 IUPAC 首选名 (Preferred IUPAC Name -- PIN)，由于中英文间差别等原因，在本建议中未作相应的规定。

系统命名名按名称的构词方式又可分成以下几种类型。

1.4.3.3.1. 取代名 (Substitutive name)

取代名是最主要的一类系统名，是表示母体结构骨架原子上或特性基团原子上一个或多个氢为其它原子或基团所取代而形成的化合物的名称，系由原母体结构或特性基团名加上表示取代原子或基团的前缀或后缀而构成，中文前缀后可加连缀字‘代’，但通

常可省略。取代名的构词形式可简单表示为：前缀—母体氢化物名—后缀。（详见第 5 章）

例：

丁-2-酮（buten-2-one）

9,10-二苯基(代)蒽（9,10-diphenylanthracene）

3-氯(代)-2-羟基己酸（3-chloro-2-hydroxyhexanoic acid）

N-甲基(代)苯甲酰胺（N-methylbenzamide）

1.4.3.3.2. 官能团类别名（Functional class name）

在化合物名称构词时以其中特性基团的类名为词尾（英文书写成分开的单词），前面加以母体结构或由母体结构衍生来的名称，构成官能团类别定名的名称，后一情况下，当为一取代基时，则可进一步称为取代基—官能团类别定名的名称。一些结构上加合后形成的名称，如吡啶氧化物；一些结构中缩减得到的名称，如酐类也属于此类命名的范畴。早期有机化学较多采用此类命名，现多改用取代名，仅在少数场合下继续采用官能团类别名。

例：

丙醛缩氨基脲（propanal semicarbazone）；

乙基甲基酮（ethyl methyl ketone）

苯甲酰氯（benzoyl chloride）

吡啶氧化物（pyridine oxide）

邻苯二甲酸酐（phthalic anhydride, o-benzenedicarboxylic anhydride）

丙醛二甲基缩醛（propanal dimethyl acetal）

1.4.3.3.3. 取代基—官能团类别名（Radicofunctional name）

见上节官能团类别定名名。

1.4.3.3.4. 并合名（Fusion name）

二个环系以共有二个或二个以上原子而形成新环的名称可采用原二个环的名称间加连缀字‘并’而构成（英文则在中间加连缀字母‘o’来构成），此名称称为并合名（fusion name）。（详见第 3 章 3.5 节）

例：

苯并呋喃 (benzofuran)

1.4.3.3.5. Hantzsch-Widman 命名 (Hantzsch-Widman name)

最初由 Hantzsch 和 Widman 提出的十员以下单环杂环命名方式所给出的名称。(参见 3.3.3.1 节)

例：

三唑 (triazole)

1.4.3.3.6. 置换名 (Replacement name)

母体结构上的原子或基团为其它的原子或基团置换后，由置换原子 (基团) 加连缀字和原母体结构的名称所构成的名称称置换名。有二种主要类型的置换名：

(i) 骨架置换名 (Skeletal replacement name)

当母体氢化物骨架原子连同其上的氢原子为其它原子 (以及其上相应的氢原子) 置换后，化合物名称采用原化合物名称前加置换原子和连缀字 ‘杂’ (英文则用连缀字母 ‘a’ 来构成)。被置换的原子不仅限于碳原子，但当氧为硫属元素所置换时用连缀字 ‘代’。

例：

硅杂环己烷 (silacyclohexane) — 硅置换碳；2*H*-硫代吡喃 (2*H*-thiopyran) — 硫置换氧。

(ii) 官能团置换名 (Functional replacement name)

名称中用前缀或中缀表明特性基团，官能性母体或类名中的氧原子或羟基为其它原子或基团所置换。当氧为硫属元素所置换时用连缀字 ‘代’，为其它元素或基团所置换时用连缀字 ‘替’。

例：

硒代苯甲酸 (selenobenzoic acid)；二硫 (代) 己酸 (hexane(dithioic) acid)；环己氨亚基替甲酸 (环己亚氨甲酸，cyclohexanecarboximidic acid) — 氨亚基置换氧亚基

1.4.3.3.7. 缀合名 (conjunctive name)

由官能团化的无环母体氢化物和一环系各自失去相应氢原子后拼合而成的结构，它

的名称即由原二部分名称相加而成，是为缀合名（参见 2.2.4. 缀合操作法）。

例：

苯-1,3,5-三乙酸（benzene-1,3,5-triacetic acid）

1.4.3.3.8. 加合名（additive name）

表示下列几种情况下形成的化合物名称：

(i) 由化合物各组成名称相加而得，其时各组成在形成化合物时不失去任何原子或基团。

官能团类别定名名：甲基乙基醚（ethyl methyl ether）；（碘甲烷）甲基碘（methyl iodide）。

环联合名：联苯（基）（biphenyl）。

无环联合名：联乙酰（biacetyl）

盐名： 乙酸钙（calcium diacetate）

加合基团名： 异丙叉二氧基（isopropylenedioxy）

(ii) 其它加入原子或基团的名称

骨架改变名：4a-增-5 α -孕甾烷（4a-home-5 α -pregnane）

加氢名：1,4-二氢萘（1,4-dihydronaphthalene）

1.4.3.3.9. 减脱名（subtractive name）

以前缀或后缀来表达原母体结构减去原子或基团后的名称，某些情况下这时修饰后的结构中会以相应数目的氢原子补入。

所用的前缀有：‘脱（去，失，降）’（de-, nor-, anhydro-）。

根据母体结构中减少的可取代氢原子的数目而使用的后缀有：基，叉基，亚基，爪基，次基（ene, yne, ylium, yl, ide）。

例：

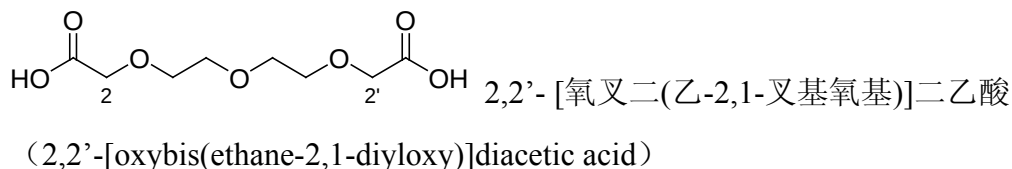
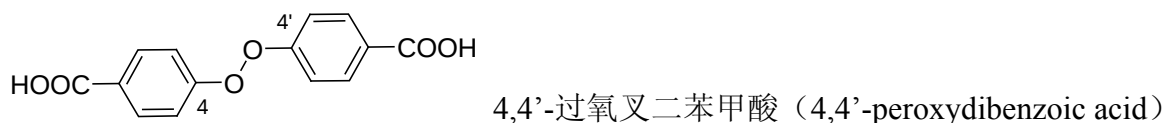
去甲基吗啡（demethylmorphine）；3-脱甲叉基半日花烷（3-norlabdane）；甲基（methyl）。

1.4.3.3.10. 多重名（multiplicative name）

表示同一母体结构多重存在时的名称，此二或多个同一母体结构是由一对称的结构

相链接，后者则可用一多价的简单或复合前缀在名称中表达。

例：



1.4.3.4. 其它系统命名

除 IUPAC 外其他一些系统也都有一些他们自己的对有机化合物命名的方式，其中较常接触到的有 CAS、Beilstein 等数据库为编辑索引而提出的索引命名法，其主要特征是以骨干母体结构名称编排，而其衍生物的名称则采用母体名后加逗号再加衍生结构名的方式，有时逗号可省略。本建议中不采用此类命名。

例：

1,4-萘二甲酸，2,3-二氯- (1,4-naphthalenedicarboxylic acid, 2,3-dichloro-)

1.4.4. 本建议中使用的一些其它术语

1.4.4.1. 高位 (Seniority, senior)

排序时优先参照用的术语。

1.4.4.2. 最低 (小) 位次组 (Lowest set of locants)

数字位次组按数字由小及大进行排列，不同组相较时，由首位开始，顺序依次比较至分出大小，小者位次组在前，为低 (小) 位次组，如 2,3,6,8 组前 (小) 于 3,4,6,8 组和 2,4,5,7 组。

加标注的位次排在未标注的位次后；数字加小写字母的位次排在相应的数字位次后。

例：

2 在 2' 前 (2 低 (小) 于 2')；3 在 3a 前 (3 低 (小) 于 3a)；8a 在 8b 前 (8a 低 (小) 于 8b)；4' 在 4a 前 (4' 低 (小) 于 4a)；1² 在 1³ 前 (1² 低 (小) 于 1³)；1⁴ 在 2' 前 (1⁴ 低 (小) 于 2')；3a 在 3a¹ 前 (3a 低 (小) 于 3a¹)。

斜体大写字母和小写字母表示的位次低于希腊字母表示的位次，后者相应地又低于数字。

例：

$N, \alpha, 1, 2$ 在 $1, 2, 4, 6$ 前 ($N, \alpha, 1, 2$ 低 (小) 于 $1, 2, 4, 6$)。

1.4.4.3. 成键数 (Bonding number) 见 2.1. 节

第 2 章 有机化合物命名通则

有机化合物的系统命名通常需要首先确定和命名它的母体结构，然后此名称上加以该化合物中所含特性基团和取代基的字或字组以及相应的连缀字，用以精确表达由母体结构到真实化合物之间的结构变化。

母体结构最普通的是母体氢化物，包括链状的、单环的、多环的以及含有杂原子的有机化合物的结构单元，母体氢化物的确定规则和命名详见第 3 章。

由母体氢化物名称到真实化合物名称这一命名过程的操作方法见下面 2.2 节；特性基团的名称见第 4 章；取代基的名称则见第 3.11 节。

详细的命名实施导引见第 5 章；有关命名中立体化学的表述见第 7 章，同位素丰度改变化合物的命名见第 9 章。

2.1. 成键数 (Bonding number)

有机化合物中各骨架原子的价键状态是其结构的基础，命名中用成键数来进行表征，对处于标准成键数的原子在命名中不予特别标明，而处于非标准成键数的原子则用位次加符号 λ^n 来标明。

定义

骨架原子的成键数 ' n ' 指其与邻近骨架原子或氢原子间的价键总数。

标准成键数

骨架原子的标准成键数见下表：

标准成键数 (n)	元素				
3	B	Al	Ga	In	Tl
4	C	Si	Ge	Sn	Pb
3	N	P	As	Sb	Bi
2	O	S	Se	Te	Po
1	F	Cl	Br	I	At

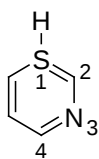
非标准成键数

母体氢化物中非标准成键数的中性骨架原子用位次加符号 λ^n 来标明。

例:

$\text{CH}_3\text{-SH}_5$ 甲基- λ^6 -硫烷 (Methyl- λ^6 -sulfane)

$(\text{C}_6\text{H}_5)_3\text{PH}_2$ 三苯基- λ^5 -甲磷烷 (Triphenyl- λ^5 -phosphane)

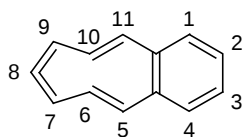


1 λ^4 ,3-硫氮杂己(慢)环; 1 λ^4 ,3-噻嗪 (1 λ^4 ,3-Thiazine)

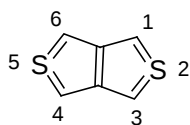
邻接形式的双键 (Contiguous formal double bonds) (累积双键)

带有最大非累积双键的环状母体氢化物中, 在一骨架原子上带有邻接形式的双键时, 用位次加符号 δ^c 来表示, c 为阿拉伯数字, 表示邻接形式的双键数。如有符号 λ^n 存在时, 符号 δ^c 置于其后。

例:



8 δ^2 -苯并[9]轮烯 (8 δ^2 -Benzo[9]annulene)



2 $\lambda^4\delta^2$,5 $\lambda^4\delta^2$ -噻吩并[3,4-c]噻吩

(2 $\lambda^4\delta^2$,5 $\lambda^4\delta^2$ -Thieno[3,4-c]thiophene)

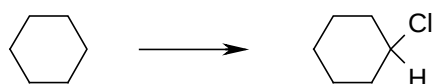
2.2. 命名操作方法 (Nomenclature operation)

本节中所述命名操作方法均涉及所命名结构的结构修饰, 并按结构修饰的方法进行分类, 被修饰的起始结构称母体结构, 命名时即以母体结构的名称为基础, 再按结构修饰的情况, 将修饰基团或原子的名称以前缀、中缀或后缀的方式加至命名中。命名化合物中母体结构的确定见第 5 章。

2.2.1. 取代操作法 (Substitutive operation)

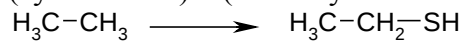
母体结构上一个或多个氢为其它原子或基团所取代时, 由此形成化合物的名称中, 采用取代入的原子或基团的名称加连缀字‘代’来构成, 通常‘代’字可以省略。另一方式是将母体基团脱氢形成的基团名加取代入的原子或基团的名称作为后缀, 有时‘基’字可省略。

例：



环己烷 氯代环己烷（环己基氯）

(cyclohexane) (chlorocyclohexane)



乙烷 乙基硫醇（乙硫醇）

(ethane) (ethanethiol)

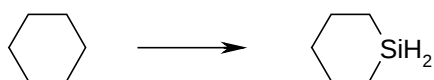
2.2.2. 置换操作法（Replacement operation）

用于一原子基团或单个非氢原子为其它基团或原子所置换时的命名方法。

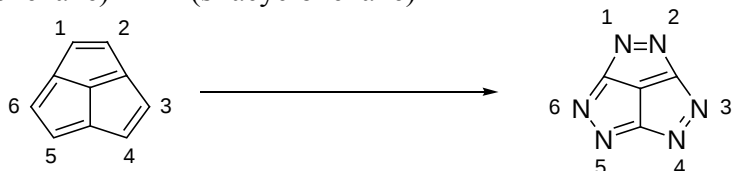
2.2.2.1. 使用连缀字‘杂’

用引入基团或原子的名称和原结构名称间加连缀字‘杂’来命名，主要见于结构中骨架碳原子为 13, 14, 15, 16 族其它原子置换时的命名。

例：



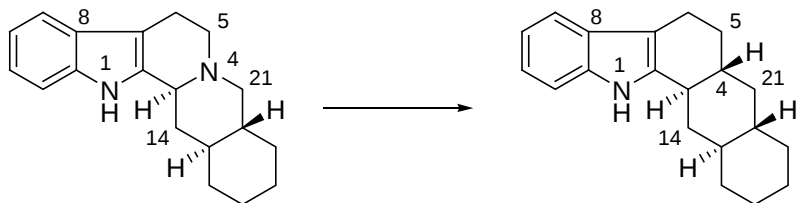
环己烷 硅杂环己烷
(cyclohexane) (silacyclohexane)



戊环并[cd]并戊轮 1,2,3,4,5,6-六氮杂戊环并[cd]并戊轮
(cyclopenta[cd]pentalene) (1,2,3,4,5,6-hexaazacyclopenta[cd]pentalene)

在诸如天然产物等场合下，也可用于结构中杂原子为碳原子置换时的命名。

例：



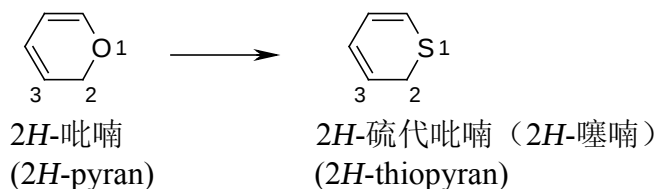
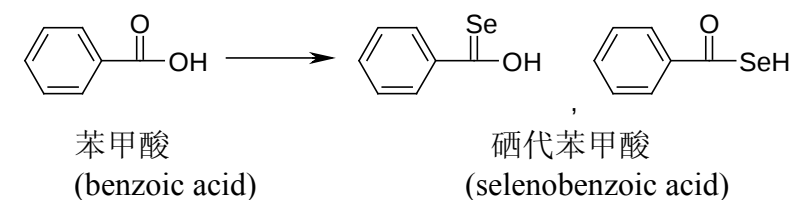
育亨烷 4βH-4-碳杂育亨烷
(yohimbane) (4βH-4-carbayohimbane)

2.2.2.2. 使用连缀字‘代’（‘替’）

当特性基团或官能性母体结构中氧原子或羟基为硫属元素置换时则用连缀字‘代’

来命名。如为其它原子或基团置换时则用连缀字‘替’来命名。

例：



$\text{C}_6\text{H}_5\text{-P(O)(OH)}_2$ 苯基膦酸 (Phenylphosphonic acid) $\rightarrow$ $\text{C}_6\text{H}_5\text{-P(O)Cl(OH)}$ 苯基氯替膦酸 (Phenylphosphonochloridic acid)

2.2.3. 加合操作法 (Additive operation)

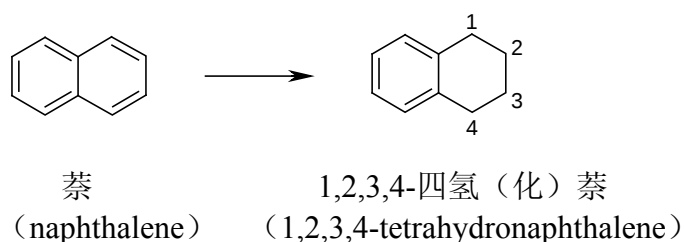
在用加合操作法命名化合物时,形式上为各结构组成相加而不失去任何原子或基团。命名时可采取下列多种方式:

2.2.3.1. 使用连缀字

2.2.3.1.1. 使用连缀字‘化’

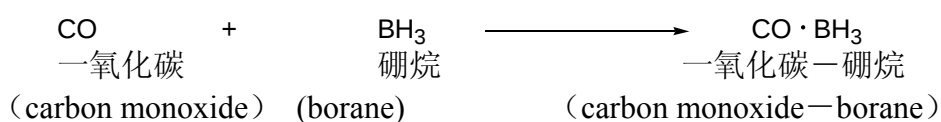
由各结构组成的名称中加连缀字‘化’而构成。通常‘化’字可以省略。

例：



2.2.3.1.2. 使用连字符 (—)

例：

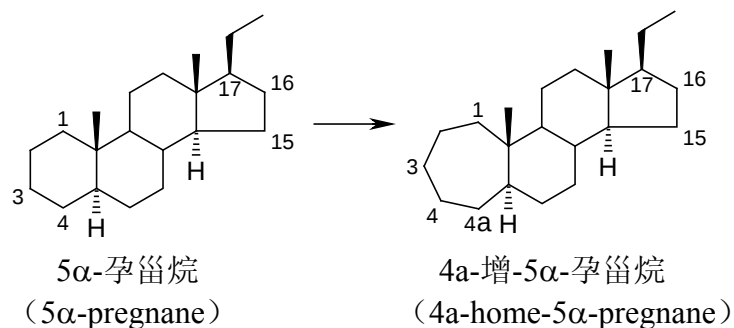


2.2.3.2. 使用前缀字

2.2.3.2.1. 使用前缀字‘增(高, 加, 扩, 升)’

对环或非环母体结构中插入一甲叉基（-CH₂-）时可用位次数字及前缀字‘增’来命名。

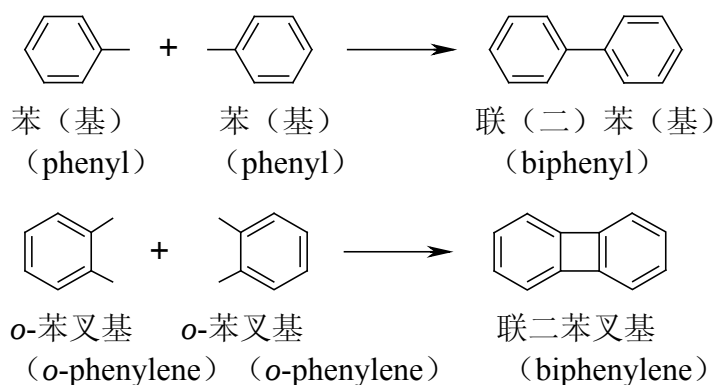
例：



2.2.3.2.2. 使用前缀字‘联’

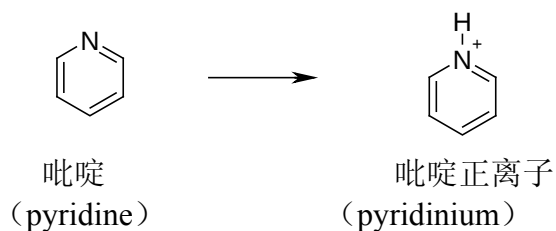
二个或二个以上的相同环结构以单键或双键直接相连的化合物，可以环结构基团的名称加前缀‘联’来命名。有时环结构基团名称中的基字可省略，则此时也可认为是按缀合操作法（见下 2.2.4.2.）来命名。

例：



2.2.3.3. 使用后缀字

例：



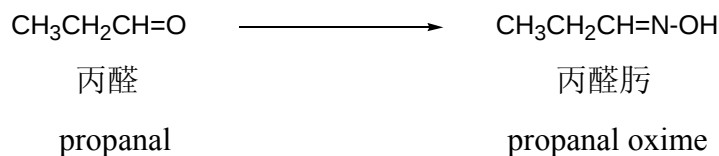
2.2.3.4. 不用连缀字直接加合

可视为官能团类别名和取代基—官能团类别名的主要构词方法。

2.2.3.4.1. 中性母体结构名加官能团类名

英文中采用分开的单词。

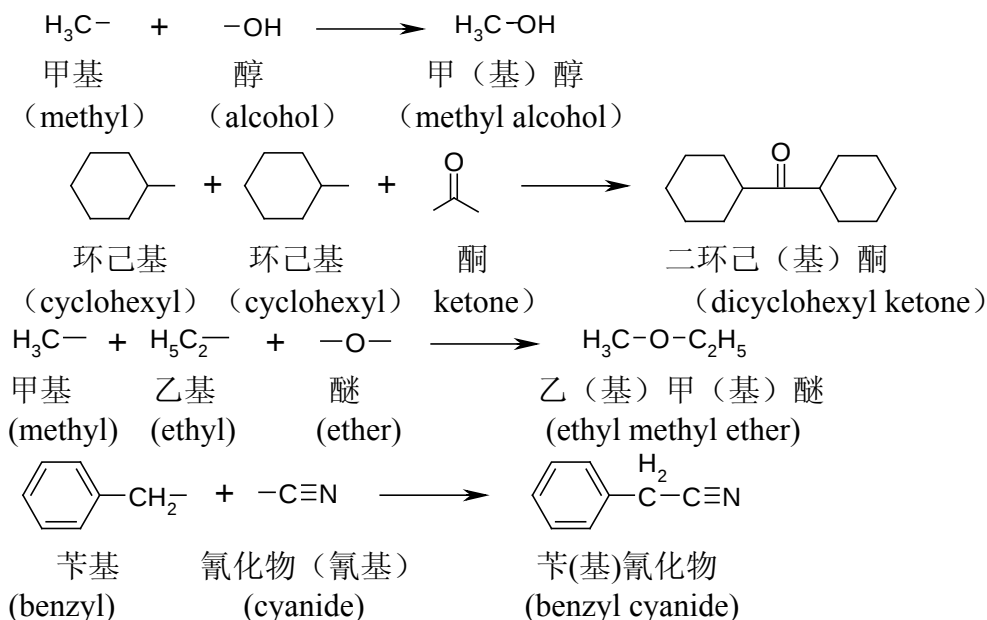
例：



2.2.3.4.2. 母体氢化物基名加官能团类名

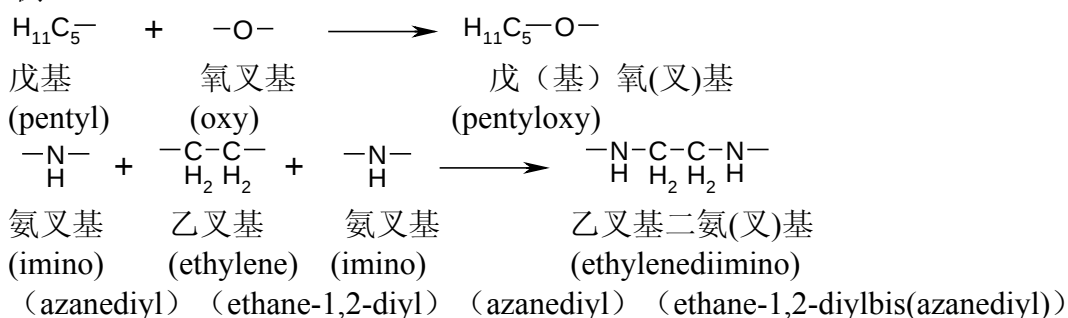
中文中‘基’字常可省略，英文中采用分开的单词。

例：



2.2.3.4.3. 串联取代基名构词法

例：

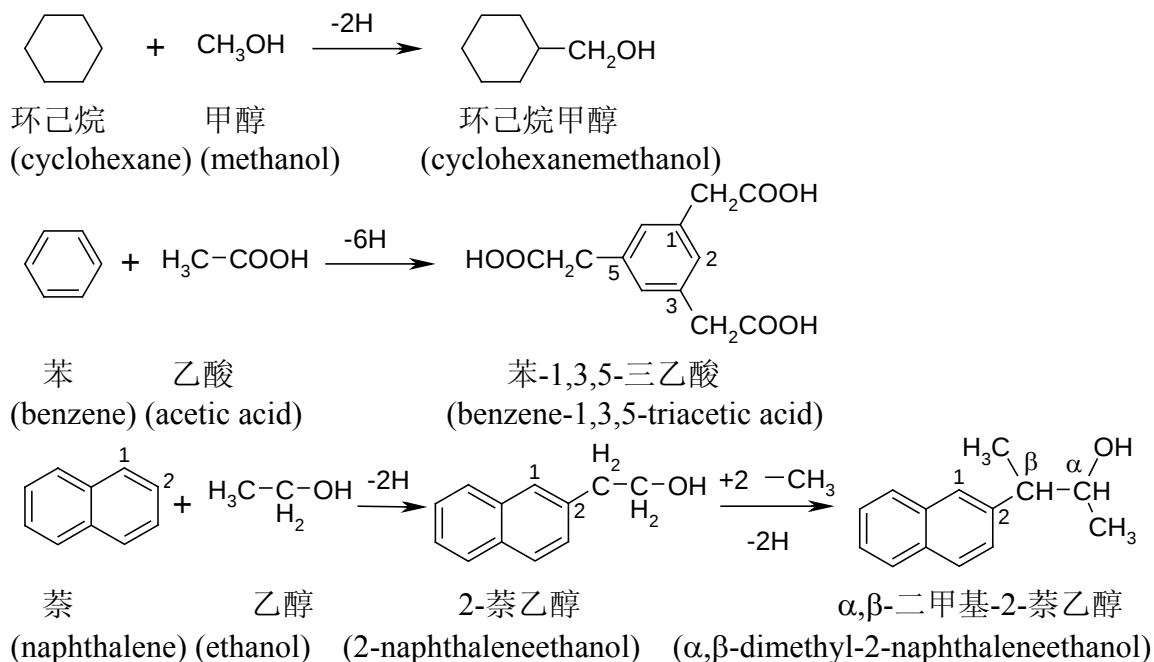


2.2.4. 缀合操作法 (Conjunctive operation)

多个结构组分通过彼此失去相同数目的氢原子后相缀合而成化合物的命名方法。

2.2.4.1. 不用连缀字直接缀合

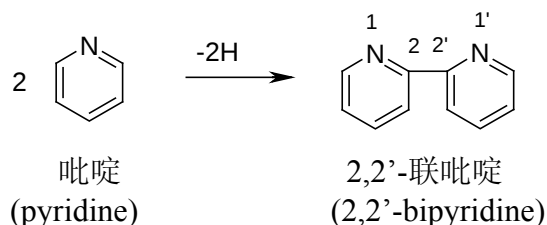
用于环结构和非环带官能团结构相缀合成化合物的命名，这时可将各部分的名称直接缀合即得化合物的名称，虽然此时各部分缀合过程中均已失去相同数目的氢原子，已不是原来名称所意味的结构。



2.2.4.2. 使用前缀字‘联’

二个或二个以上的相同环结构直接相连的化合物，可以环结构的名称加前缀‘联’来命名。虽然此时原环结构相连处均失去一氢原子，已不是原来名称所意味的环结构。此时也可认为是按置换操作法命名（参见 2.2.3.2.2.），但省略了环结构基团名称中的基字。

例：



2.2.5. 减脱操作法 (Subtractive operation)

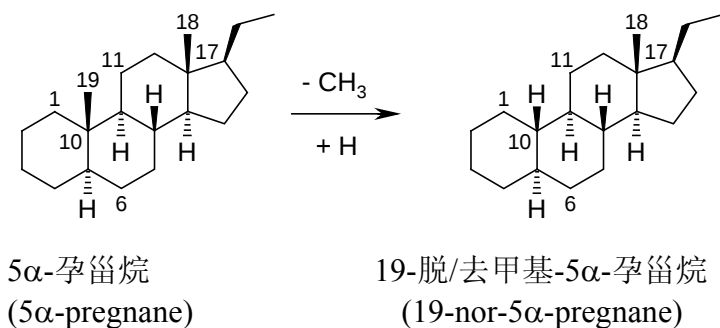
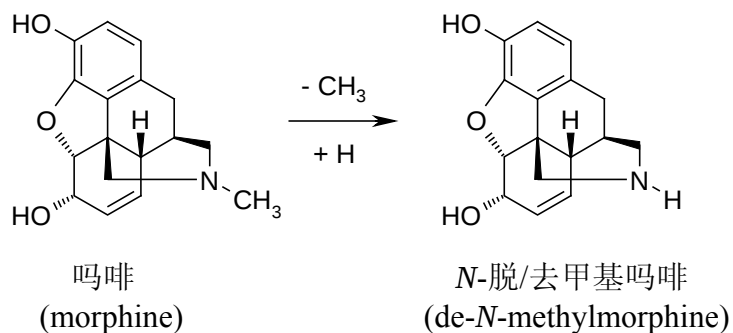
用于表示在结构中消除一原子、离子或基团后的命名方法，也包括脱水并形成新键后的命名。

2.2.5.1. 使用前缀字‘脱（去，失，降）’

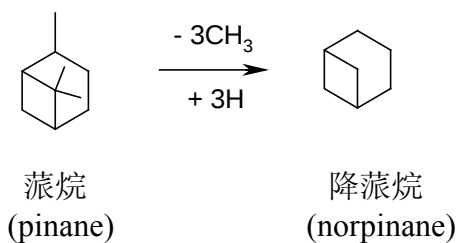
在原结构的名称前加前缀字‘脱（去，失，降）’和消除的原子、离子或基团名称。

例：

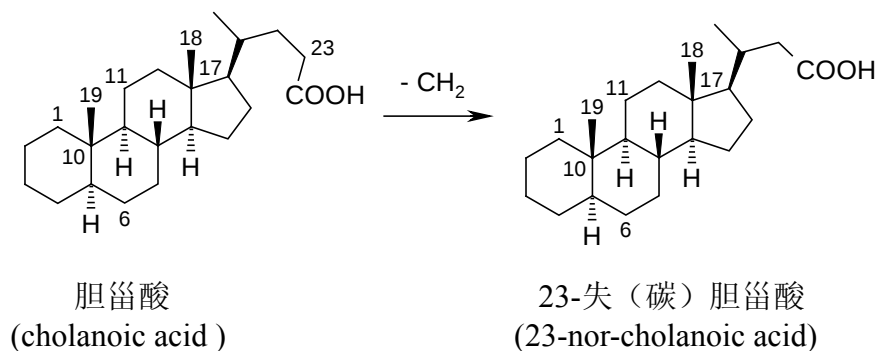
消除甲基，而代之以氢，使用前缀字‘脱/去甲基’。

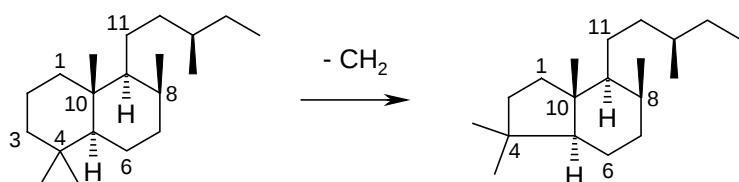


在萜类化合物的命名中，消除一或多个甲基，而代之以氢，使用前缀字‘降’。



碳链或碳环中消除一甲叉基，使用前缀字‘失（碳）’。

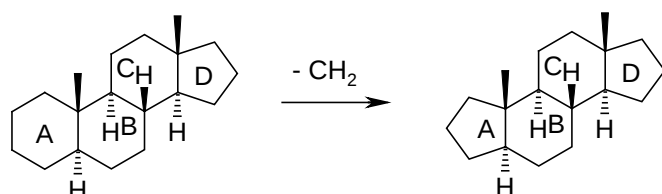




半日花烷
(labdane)

3-失(碳)半日花烷
(3-norlabdane)

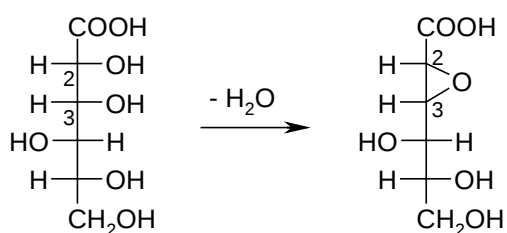
多环化合物如甾体环中消除一甲叉基时,可用环的编号来标明消除的位次,并使用前缀字‘降’。



雄甾烷
androstane

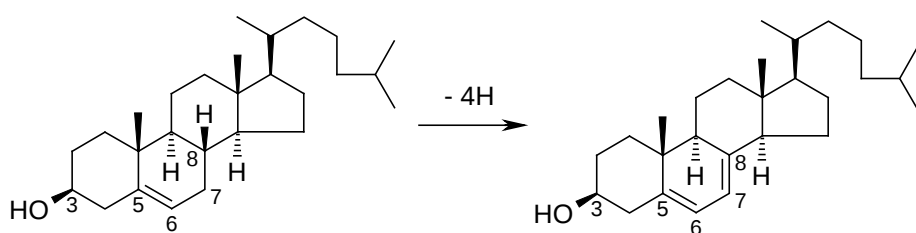
A-降雄甾烷
A-nor-androstane

脱水,脱氢,脱氧等场合即采用相应的前缀。



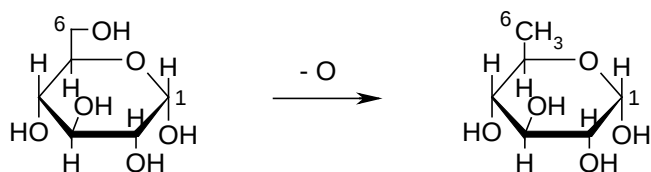
D-古罗糖酸
(D-gulonic acid)

2,3-脱水-D-古罗糖酸
(2,3-anhydro-D- gulonic acid)



胆固醇
(cholesterol)

7,8-脱氢胆固醇
(7,8-didehydrocholesterol)



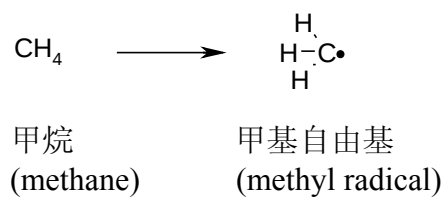
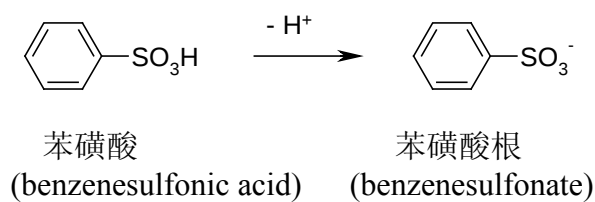
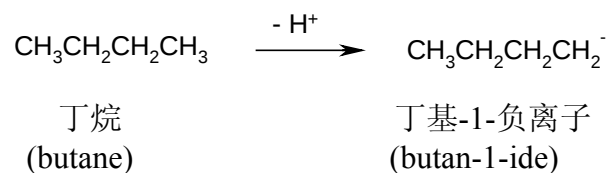
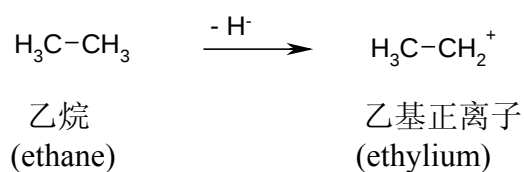
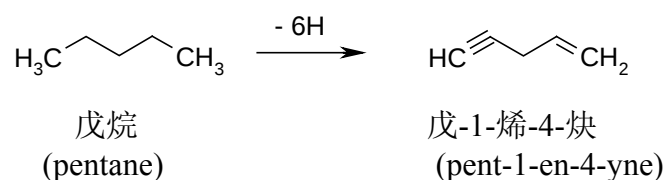
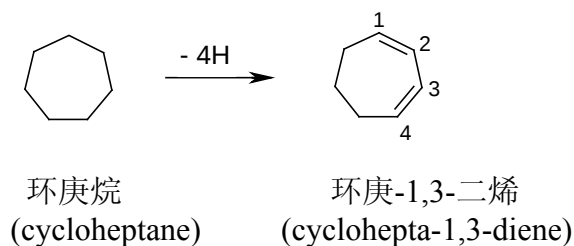
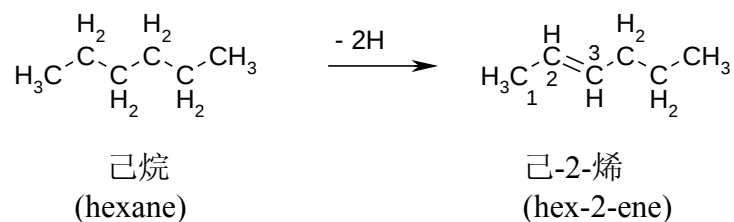
α -D-吡喃葡萄糖
(α -D-glucopyranose)

6-脱氧- α -D-吡喃葡萄糖
(6-deoxy- α -D-glucopyranose)

2.2.5.2. 改变后缀

改变原结构的名称的后缀，主要用于消去氢、氢负离子、氢正离子或氢自由基的命名。

例：

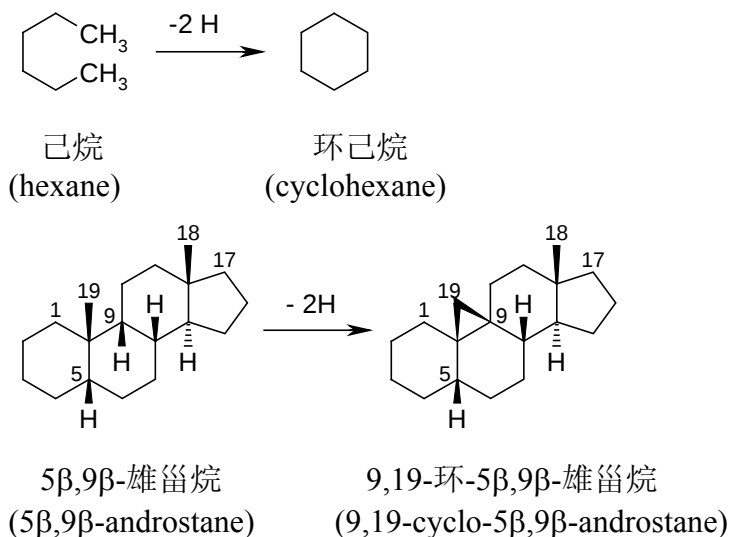


2.2.6. 环开闭操作法 (Ring formation or cleavage)

2.2.6.1. 使用前缀字‘环’

母体结构中任二原子各失去一氢原子后成环，由此形成的化合物可以母体结构的名称加前缀‘环’来命名。

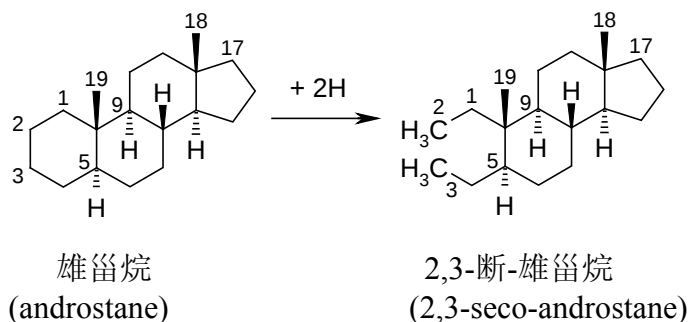
例：



2.2.6.2. 使用前缀字‘断’（开）

母体环断开后的二端各加上一氢原子，由此形成的化合物可以母体结构的名称加前缀‘断’来命名。

例：

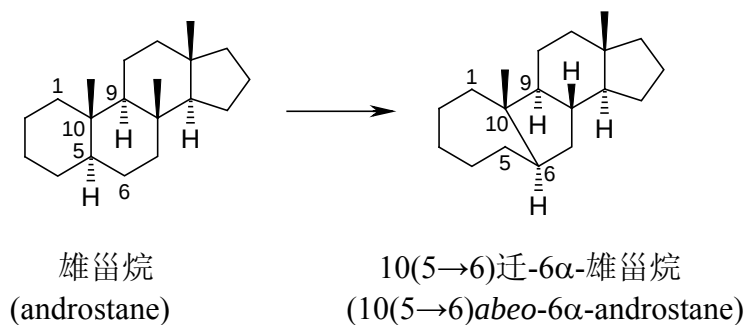


2.2.7. 重排操作法（Rearrangement）

2.2.7.1. 使用前缀字‘迁’

分子骨架上键迁移后形成的新结构可用迁移前母体结构的名称加‘x(y→z)’及前缀‘迁’来命名，x表示迁移键的固定端位次，y表示迁移键的迁移端位次，z表示迁移后的位次，迁移后的立体化学则需在命名中另行表述。

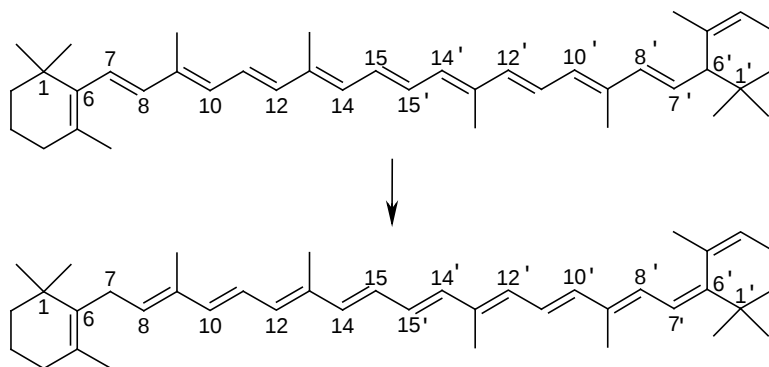
例：



2.2.7.2. 使用前缀字‘逆’

胡萝卜素类结构的中部共轭双键发生重排，可使用前缀字‘逆’进行命名。

例：



β,ϵ -胡萝卜素 (β,ϵ -carotene) $\rightarrow$ β,ϵ -6',7-逆胡萝卜素(β,ϵ -6',7-retro-carotene)

在多肽命名中前缀字‘逆’可用于表示羧端和氨端倒转，如 Ala-Lys-Glu-Tyr-Leu 倒转为 Leu-Tyr-Glu-Lys-Ala。

2.2.8. 复合操作法 (Multiplicative operation)

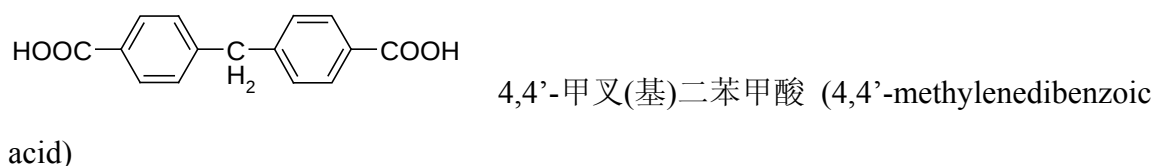
2.2.8.1. 涉及二或多价取代基组合体的命名

化合物的一个二或多价取代基对称地连接有二或多个相同的带有主体特性基团的结构单元时，化合物的命名可按下述顺序依次排列：1) 此二或多价取代基相连于该结构单元的位次；2) 此二或多价取代基的名称；3) 连接的该结构单元的个数，二、三等；4) 该带主体特性基团结构单元的名称。如无歧义时，中文的基字或叉基、爪基可省略。

例：

$S(CH_2-CH_2-COOH)_2$ 3,3'-硫(叉基)二丙酸 (3,3'-sulfanediyl dipropanoic acid)

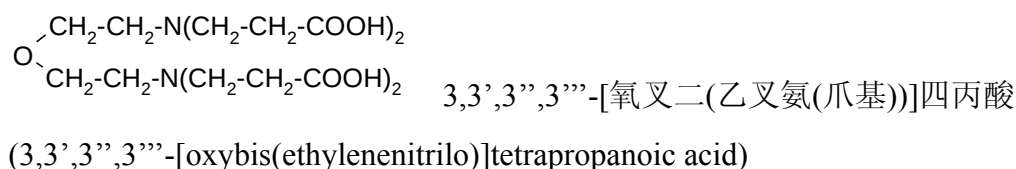
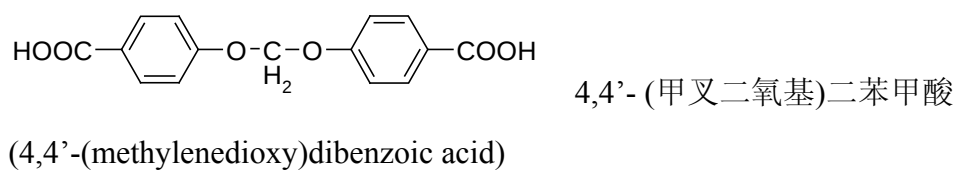
$N(CH_2-COOH)_3$ 氨(爪基)三乙酸 (nitrilotriacetic acid)



2.2.8.2. 具对称二或多价取代基时的命名

可先列出中心取代基的名称后，再直接缀合其上二或多个同一结构的名称。

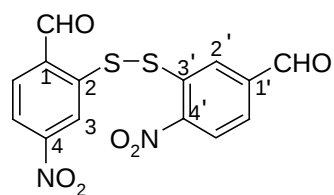
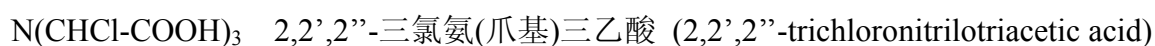
例：



2.2.8.3. 同一结构单元组合体衍生物的命名

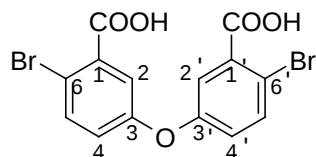
2.2.8.1.节中组合体衍生物的命名可在前缀中加入相应的名称和位次来解决。在位次编号时主体特性基团和二或多价取代基优先。

例：



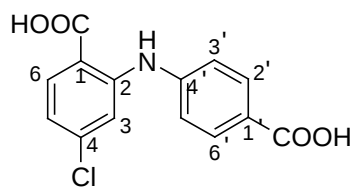
4,4'-二硝基-2,3'-二硫叉基二苯甲醛

(4,4'-dinitro-2,3'-disulfanyldibenzaldehyde)



6,6'-二溴-3,3'-氧叉基二苯甲酸

(6,6'-dibromo-3,3'-oxydibenzoic acid)



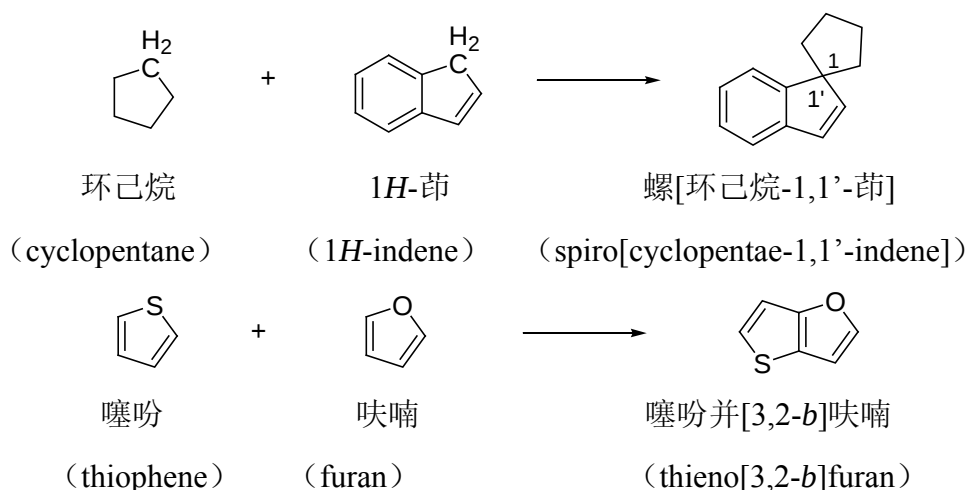
4-氯-2,4'-氨基二苯甲酸

(4-chloro-2,4'-iminodibenzoic acid)

2.2.9. 并合操作法 (Fusion operation)

二个环或环系通过公用彼此间的原子或原子及键而形成的多环体系, 它的名称可在原二个环名的基础上, 通过加入相应的前缀字或连缀字以进行命名。公用一个原子的见螺环的命名 (3.7 节), 公用原子及键的见并环的命名 (3.5 节)。

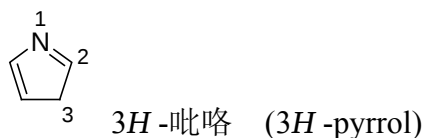
例:



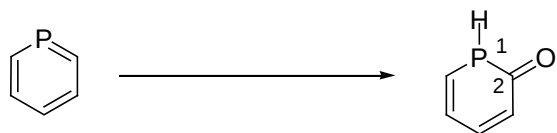
2.3. 额外氢 (指示氢 Indicated hydrogen) 的标明

对含有最大非累积双键数的环或环系 (慢环环系), 有时需要标明环中未连有双键的位次, 为此可视为该位上带有额外的氢, 而采用在其母体名称前加位次和大写并斜体的氢 (*H*) 来命名。

例:

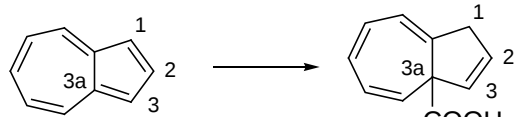


另一种情况是一母体结构衍生化后有氢的加入 (此时也可称为 ‘增加氢 (added hydrogen)’, 这时用括号将加入氢的位次和大写并斜体的氢 (*H*) 置于表达该衍生化的前缀或后缀字之前。



磷杂己环（磷杂苯，磷𪔐）
(phosphinine)

磷杂己环-2(1*H*)-酮（磷𪔐-2(1*H*)-酮）
(phosphinin-2(1*H*)-one)



𬵚
(azulene)

𬵚-3a(1*H*)-甲酸
(azulene-3a(1*H*)-carboxylic acid)

第 3 章 母体氢化物以及由此形成的取代基

有机化合物名称是由化合物母体结构的名称，即母体氢化物（烃等）的名称和取代基以及特性基团（官能(基)团）的名称以及各种词缀所构成。因此母体氢化物的命名正是有机化合物命名的基础和出发点。

3.1. 有机化合物中的基元氢化物

有机化合物中的母体氢化物除最主要的碳氢化合物（烃）外，还有多种，下表（表 3-1）列出它们的基元（单核）氢化物（Mononuclear hydrides）（除甲烷外甲字省略）。

表 3-1. 基元(单核)氢化物

BH ₃	硼烷	Borane	SbH ₅	λ ⁵ -锑烷	λ ⁵ -Stibane (Stiborane)
AlH ₃	铝烷	Alumane	BiH ₃	铋烷	Bismuthane (Bismuthine)
GaH ₃	镓烷	Gallane	OH ₂	氧烷（水）	Oxidane (Water)
InH ₃	铟烷	Indigane	SH ₂	硫烷（硫化氢）	Sulfane (hydrogen sulfide)
TlH ₃	铊烷	Thallane	SH ₄	λ ⁴ -硫烷	λ ⁴ -Sulfane
CH ₄	甲烷(碳烷)	Methane (Carbane)	SH ₆	λ ⁶ -硫烷	λ ⁶ -Sulfane
SiH ₄	硅烷	Silane	SeH ₂	硒烷	Selane
GeH ₄	锗烷	Germane	TeH ₂	碲烷	Tellane
SnH ₄	锡烷	Stannane	PoH ₂	钋烷	Polane
PbH ₄	铅烷	Plumbane	FH	氟烷（氟化氢）	Fluorane (hydrogen fluoride)
NH ₃	氮烷（氨）	Azane (Ammonia)	ClH	氯烷（氯化氢）	Chlorane (hydrogen chloride)
PH ₃	磷烷	Phosphane (Phosphine)	BrH	溴烷（溴化氢）	Bromane (hydrogen bromide)
PH ₅	λ ⁵ -磷烷	λ ⁵ -Phosphane (Phosphorane)	IH	碘烷（碘化氢）	Iodane (hydrogen iodide)
AsH ₃	砷烷	Arsane(Arsine)	IH ₃	λ ³ -碘烷	λ ³ -Iodane
AsH ₅	λ ⁵ -砷烷	λ ⁵ -Arsane (Arsorane)	IH ₅	λ ⁵ -碘烷	λ ⁵ -Iodane
SbH ₃	锑烷	Stibane(Stibine)	AtH	砹烷	Astatane

3.2. 无环多核氢化物

3.2.1. 无环烃

直链饱和碳氢化合物（烃）碳数自 C_1 至 C_{10} 用天干甲、乙、丙、丁、戊、己、庚、辛、壬、癸加烷字命名， C_{11} 以上用相应的中文数字加烷字命名。碳字通常省略，但对 C_{11} 以上的不饱和烃则‘碳’字不能省略。

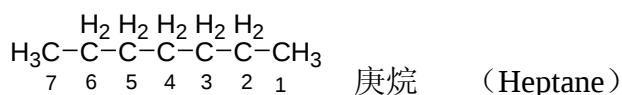
例：

表 3-2. 直链饱和烃的名称

碳数	名称	英文名称	碳数	名称	英文名称
1	甲烷	Methane	11	十一烷	Undecane
2	乙烷	Ethane	12	十二烷	Dodecane
3	丙烷	Propane	13	十三烷	Tridecane
4	丁烷	Butane	20	二十烷	Icosane
5	戊烷	Pentane	21	二十一烷	Henicosane
6	己烷	Hexane	22	二十二烷	Docosane
7	庚烷	Heptane	23	二十三烷	Tricosane
8	辛烷	Octane	30	三十烷	Tricontane
9	壬烷	Nonane	40	四十烷	Tetracontane
10	癸烷	Decane	100	百烷	Hectane

链上原子的位次以阿拉伯数字由一端至另一端依次编号。

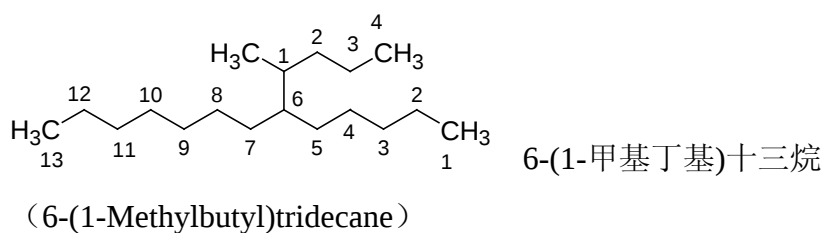
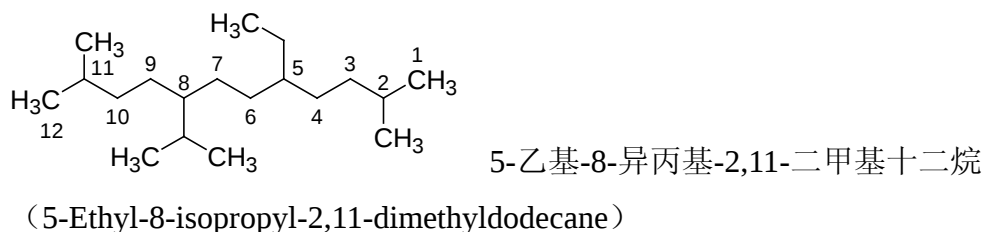
例：



带支链的烷烃按支链为取代基的方式命名，该化合物中最长的链称主链，以此主链的名称为词根（后缀），主链上的支链作为取代基（参见 3.11 节），以前缀形式加在词根前，并标明在主链上的位次。此时主链的编号应使支链的位次最低，在有多条支链时，则采用最低（小）位次组（参见 1.4.4.2 节）的编号程序。各支链取代基名称在 IUPAC 英文命名中按英文字母顺序在前缀中依次排列，但《有机化学命名原则》（1980）中则按其立体化学顺序规则中的大小，自小至大在前缀中依次排列。考虑到某些基团无法按顺序规则确定大小，以及便于中英命名的转换，和与其它场合时排序方式的统一，本次修订建议也按取代基英文名称的字母顺序在前缀中依次排列。当支链上还有支链时，按

类似方式进行进一步命名。

例：



下列带支链烃的名称仍保留使用，但仅用于其上不含取代基时：

$(\text{CH}_3)_2\text{CH}-\text{CH}_3$ 异丁烷 (Isobutane)

$(\text{CH}_3)_2\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ 异戊烷 (Isopentane)

$(\text{CH}_3)_4\text{C}$ 新戊烷 (Neopentane)

$(\text{CH}_3)_2\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ 异己烷 (Isohexane)

不饱和烃中重键按特性（官能）基团方式命名（见 4.1.节）。

3.2.2. 除烃和硼烷外的无环均一氢化物

除烃和硼烷外的无环均一氢化物可参照无环烃的命名方式和该类氢化物的名称进行命名。

例：

NH_2-NH_2 乙氮烷 (Diazane, Hydrazine)

$\text{HS}-\overset{3}{\text{S}}-\overset{2}{\text{S}}-\overset{1}{\text{S}}-\text{H}$ $2\lambda^6$ -丙硫烷 ($2\lambda^6$ -Trisulfane)

$\text{SiH}_3-\text{SiH}_2-\text{SiH}_2-\text{SiH}_2-\text{SiH}_3$ 戊硅烷 (Pentasilane)

$\text{H}_2\text{N}-[\text{NH}]_7-\text{NH}_2$ 壬氮烷 (Nonaazane)

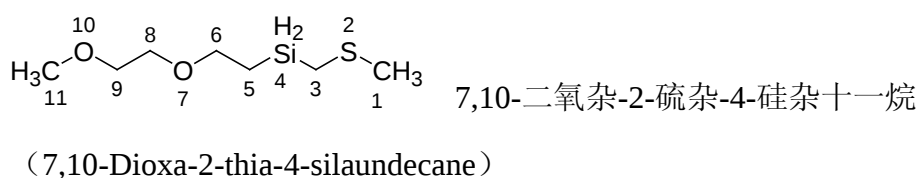
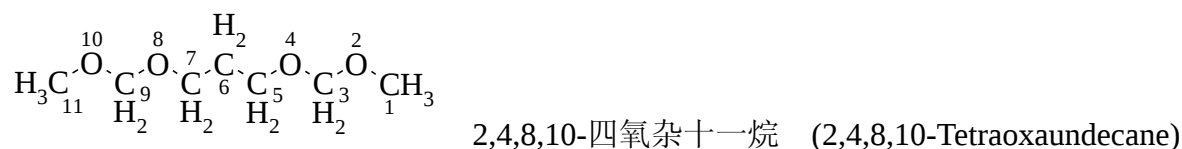
$\text{PH}_2-\text{PH}-\text{PH}-\text{PH}-\text{PH}_2$ 戊磷烷 (Pentaphosphane)

3.2.3. 杂链氢化物

3.2.3.1. 含杂原子的碳链

对含杂原子的碳链结构按置换操作法命名（见 2.2.2. 节）。当有多种杂原子时，前缀中杂原子按高位顺序（参见表 3-3）依次排列。

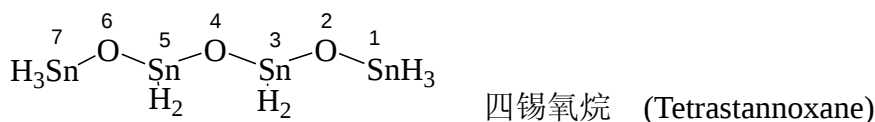
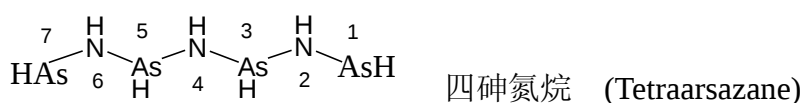
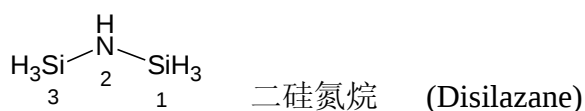
例：



3.2.3.2. 二种杂原子的奇数交替链

对二种杂原子的奇数交替链采用二端的杂原子（数目多）的数目和名称为词头，另一杂原子烷为词尾进行命名。

例：



3.3. 单环氢化物

3.3.1. 单环烃

3.3.1.1. 饱和单环烃

采用环开闭操作法，在相应直链烃的名称前加前缀字‘环’来命名，类名为环烷。

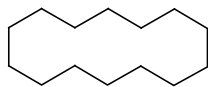
例：



环丙烷 (Cyclopropane)



环己烷 (Cyclohexane)



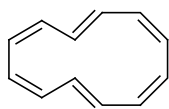
环十四烷 (Cyclotetradecane)

不饱和单环烃按特性(官能)基团方式命名(见 4.1 节),带支链的单环烃按支链为取代基的方式命名。

3.3.1.2. 无取代的含最大非累积双键数的单环不饱和烃(轮烯)

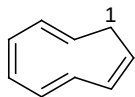
含最大非累积双键数的单环不饱和烃,通式为 C_nH_n 或 C_nH_{n+1} ($n>6$),通称为轮烯(Annulenes)。具体化合物以 $[n]$ 轮烯命名,对 n =奇数的轮烯可用氢的标注法在词前标出; $n=6$ 时即为苯,不称作 $[6]$ 轮烯。在并环等复杂体系命名作主环时,方括号加阿拉伯数字可代之以天干数字;而作为并环拼合体命名时,英文中采用环烃前缀名(cycloalka),如 cyclobuta, cycloocta 等代替,作为置换法命名的母体时,英文中采用将饱和烷烃的词尾‘ane’改成‘ine’进行命名,因此建议中文中可相应采用表示环大小的天干或十一以上的数字加‘(慢)环’进行命名,通常‘慢’字省略。

例:



$[12]$ 轮烯 (十二轮烯, 环十二碳-1,3,5,7,9,11-六烯) ($[12]$ Annulene

(Cyclododeca-1,3,5,7,9,11-hexaene)) 十二(慢)环(cyclododecine) — 作为置换法命名母体



1H-[9]轮烯 (1H-壬轮烯, 环壬-1,3,5,7-四烯) (1H-[9]Annulene

(Cyclonona-1,3,5,7-tetraene)) 1H-壬(慢)环(1H-cyclononine) — 作为置换法命名母体

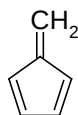
3.3.1.3. 俗名单环烃

单环母体氢化物中的苯和富烯作为俗名仍保留使用,但英文中的另一些母体氢化物的俗名或半系统名称如 Xylene, Mesitylene, Cumene, Cymene 则建议在中文命名体系中使用系统命名二甲苯、间三甲苯、异丙苯和甲基异丙基苯,而不用它们的中文俗名如枯烯

(Cumene)、百里香素 (Cymene) 等。



苯 (Benzene)

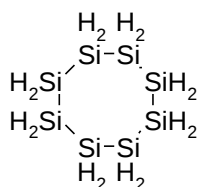


富烯 (Fulvene)

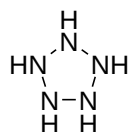
3.3.2. 除烃和硼烷外的单环均一氢化物

采用环开闭操作法，在相应直链杂原子氢化物的名称前加前缀字‘环’来命名。

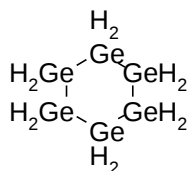
例：



环辛硅烷 (Cyclooctasilane)



环戊氮烷 (Cyclopentaaazane)



环己锗烷 (Cyclohexagermane)

3.3.3. 除硼烷外的含杂原子单环氢化物

3.3.3.1. Hantzsch-Widman 杂环命名系统

对含杂原子的 3—10 员单环化合物除有俗名外，在英文命名中采用扩展了的 Hantzsch-Widman 杂环命名系统命名，其要点为采用环中杂原子的数目和前缀名为前缀，再和表示环大小以及饱和度的后缀结合成化合物名。相应中文命名时，其前缀可简单地转译自英文，即使用杂原子的元素名加杂，但习惯上使用的用‘噁’表示‘氧杂’和用‘噻’表示‘硫杂’则仍可使用。各杂原子的前缀名以高位依次排列见下表 3-3。对含多个杂原子杂环命名时，按杂原子的高位次依次排列，并以最高位的杂原子起开始编号。

中文前缀中元素名后的‘杂’字在不致引起误解时可予省略。

表 3-3 中文 Hantzsch-Widman 杂环命名系统的前缀

元素	成键数	英文前缀	中文前缀	元素	成键数	英文前缀	中文前缀
F	1	fluora	氟杂	Sb	3	stiba	锑杂
Cl	1	chlora	氯杂	Bi	3	bisma	铋杂
Br	1	broma	溴杂	Si	4	sila	硅杂
I	1	ioda	碘杂	Ge	4	germa	锗杂
O	2	oxa	氧杂，噁	Sn	4	stanna	锡杂
S	2	thia	硫杂，噻	Pb	4	plumba	铅杂
Se	2	selena	硒杂	B	3	bora	硼杂
Te	2	tellura	碲杂	Al	3	aluma	铝杂
N	3	aza	氮杂	Ga	3	galla	镓杂
P	3	phospha	磷杂	In	3	indiga	铟杂
As	3	arsa	砷杂	Tl	3	thalla	铊杂

1980 年中国化学会公布的‘有机化学命名原则’对 Hantzsch-Widman 杂环命名系统未作相应的处理，因此中文中用何种后缀来表达环的大小尚无明确的规范，过去习惯上的命名法对未有俗名的杂环单环采用置换法命名，即用含最大非累积双键数的不饱和环环名为后缀，三至十员环依次为环丙烯、环丁二烯、环戊二烯、环己三烯（苯）、环庚三烯、环辛四烯、环壬四烯和环癸五烯；对部份饱和和全饱和的环则采用相应的环烯名和环烷名。此外也较普遍地接受了少数表示杂环单环的仿 Hantzsch-Widman 命名法的专用名词，如表示五员含氮杂环的‘唑’（azole）和六员含氮杂环的‘嗟’（azine），但此时不仅表示了环的大小，而且包括了氮杂的含义，只是不用于只含单独一个氮原子的场合，因单独一个氮原子的唑有俗名吡咯，单独一个氮原子的嗟即吡啶。对于半饱和的五员含氮环也有用唑啉为后缀命名，饱和的六员含氧环和含硫环则用噁烷和噻烷命名。根据这一情况相应于 Hantzsch-Widman 杂环命名系统的中文命名法可归纳为下表的第一方案（表 3-4）。

表 3-4 中文 Hantzsch-Widman 杂环命名系统的后缀——第一方案

环大小	英文不饱和后缀	中文不饱和后缀	英文饱和后缀	中文饱和后缀
3	irene (irine*)	环丙烯	irane (iridine*)	环丙烷 (丙啶*)
4	ete	环丁二烯	etane (etidine*)	环丁烷
5A	ole	唑	olidine (oline**)	唑烷 (唑啉**)
5B	ole	环戊二烯	olane	环戊烷
6A	ine	环己三烯 (苯)	ane	环己烷, 噁烷 ***, 噻烷****
6B	ine	嗟*	inane	环己烷
6C	inine	环己三烯 (苯)	inane	环己烷
7	epine	环庚三烯	epane	环庚烷
8	ocine	环辛四烯	ocane	环辛烷
9	onine	环壬四烯	onane	环壬烷
10	ecine	环癸五烯	ecane	环癸烷

5A: 杂原子=N

5B: 除氮外杂原子

6A: 杂原子=O, S, Se, Te, Bi, Hg

6B: 杂原子=N, Si, Ge, Sn, Pb

6C: 杂原子=B, F, Cl, Br, I, P, As, Sb

* 杂原子=N; ** 半饱和; *** 杂原子=O; ****杂原子=S

考虑到中英文命名间的方便转换, 和在多环体系命名时的需要, 而且上述第一方案中的中文不饱和后缀又较为繁琐, 因此建议参考慢 (发音 man) 环环系 (mancude-ring systems) 的命名方法, 含最大非累积双键数的不饱和环系称慢环 (英文 mancude 是具最大非累积双键数 Maximum Number of nonCUmulated Double bond 的缩略语), 其中含最大非累积双键数的单环不饱和烃称[p]轮烯([p]Annulene) (p 为表示环大小的数字) (见 3.3.1.2), 但在作为并环拼合体命名时不能采用轮烯这一名称, 英文中采用环烃前缀名 (cycloalka), 如 cyclobuta, cycloocta 等, 为此建议中文中可相应采用表示环大小的天干或

十一以上的数字加‘(慢)环’进行命名，通常‘慢’字省略。按此方式 Hantzsch-Widman 杂环中文命名时不饱和后缀可采用丙～癸(慢)环，对饱和后缀可采用丙～癸环烷或采用一般的后缀环丙～癸烷。对已沿用的嗪、唑、唑烷、噁烷等则仍可使用。此建议用法见表 3-4 ——第二方案。

表 3-4 中文 Hantzsch-Widman 杂环命名系统的后缀——第二方案

环大小	英文不饱和后缀	中文不饱和后缀	英文饱和后缀	中文饱和后缀*****
3	irene (irine*)	丙(慢)环	irane (iridine*)	丙环烷（丙啶*） （环丙烷）
4	ete	丁(慢)环	etane (etidine*)	丁环烷（环丁烷）
5A	ole	戊(慢)环（唑）	olidine (oline**)	戊环烷（唑烷）（环戊烷） （唑啉**）
5B	ole	戊(慢)环	olane	戊环烷（环戊烷）
6A	ine	己(慢)环	ane	己环烷（环己烷） （噁烷***）（噻烷****）
6B	ine	己(慢)环（嗪*）	inane	己环烷（环己烷）
6C	inine	己(慢)环	inane	己环烷（环己烷）
7	epine	庚(慢)环	epane	庚环烷（环庚烷）
8	ocine	辛(慢)环	ocane	辛环烷（环辛烷）
9	onine	壬(慢)环	onane	壬环烷（环壬烷）
10	ecine	癸(慢)环	ecane	癸环烷（环癸烷）

5A: 杂原子=N

5B: 除氮外杂原子

6A: 杂原子=O, S, Se, Te, Bi, Hg

6B: 杂原子=N, Si, Ge, Sn, Pb

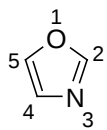
6C: 杂原子=B, F, Cl, Br, I, P, As, Sb

* 杂原子=N; ** 半饱和; *** 杂原子=O; *****杂原子=S

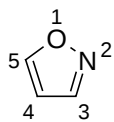
***** 此类中文后缀限于 3—10 员杂环单环化合物的命名

考虑到命名系统化与传统习惯因素，本建议建议优先采用第二方案，但也可采用第一方案。

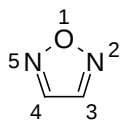
例：



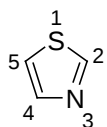
1,3-噁唑 (1,3-Oxazole); 1,3-氧氮杂戊(炔)环 (按第二方案)



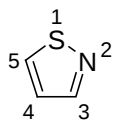
1,2-噁唑 (异噁唑) (1,2-Oxazole, Isoxazole); 1,2-氧氮杂戊(炔)环 (按第二方案)



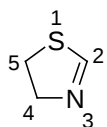
1,2,5-噁二唑 (曾用名一呋咱) (1,2,5-Oxadiazole (Furazan)); 1,2,5-氧二氮杂戊(炔)环 (按第二方案)



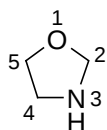
1,3-噻唑 (1,3-Thiazole) ; 1,3-硫氮杂戊(炔)环 (按第二方案)



1,2-噻唑 (异噻唑) (1,2-Thiazole, Isothiazole); 1,2-硫氮杂戊(炔)环 (按第二方案)



2-噻唑啉 (2-Thiazoline); 4H,5H-1,3-硫氮杂戊(炔)环 (按第二方案)



噁唑烷 (Oxazolidine); 1,3-氧氮杂戊环烷, 1,3-氧氮杂环戊烷 (按第二方案)



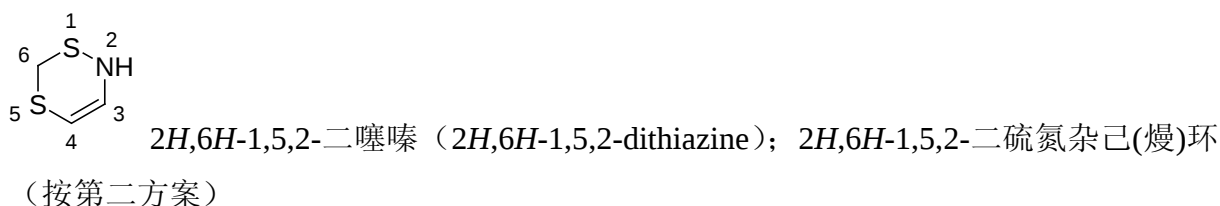
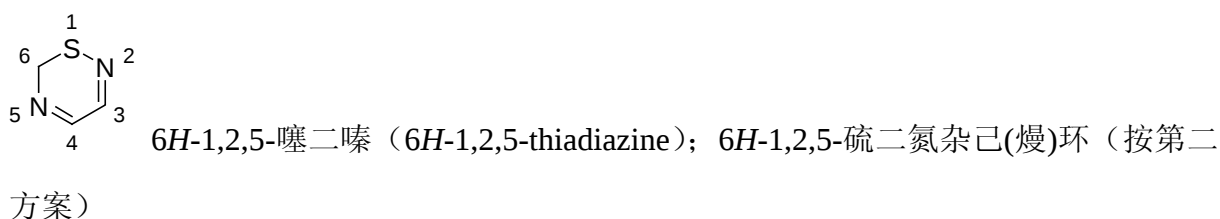
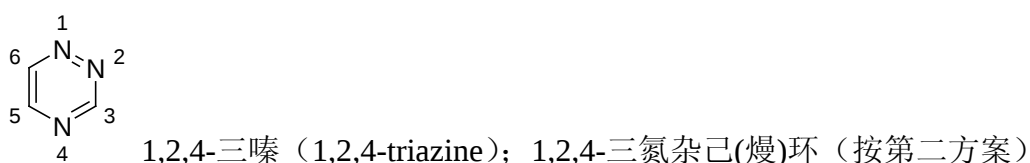
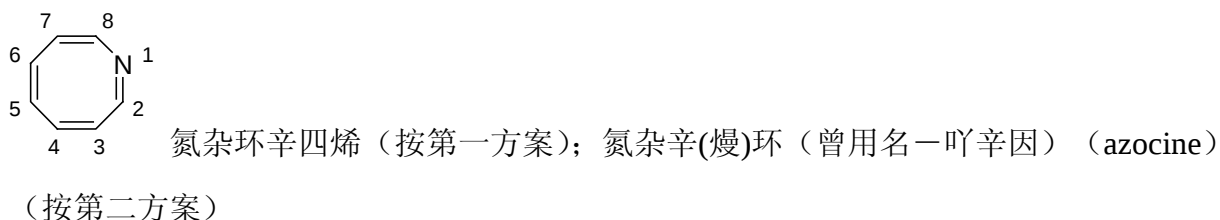
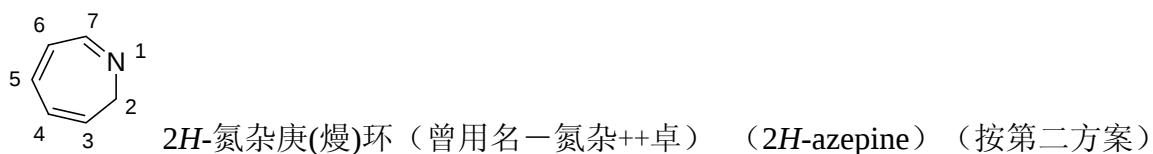
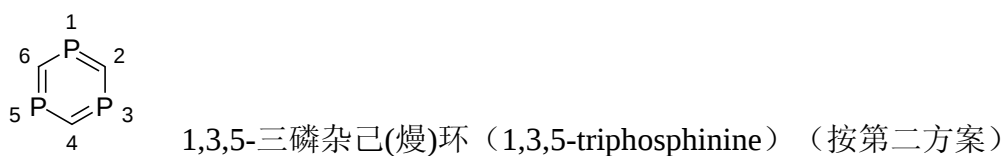
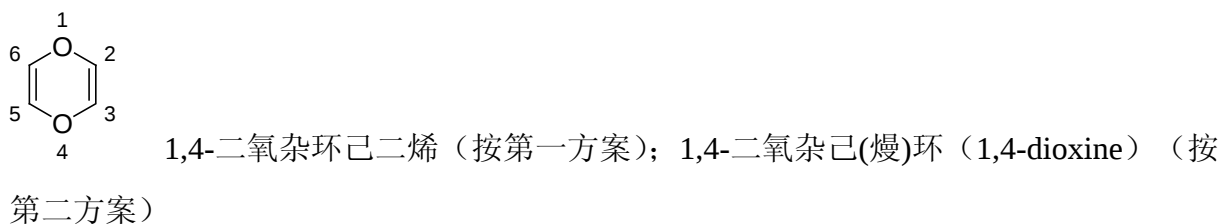
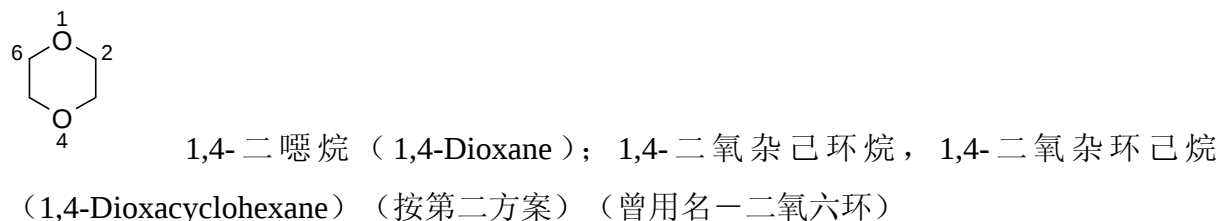
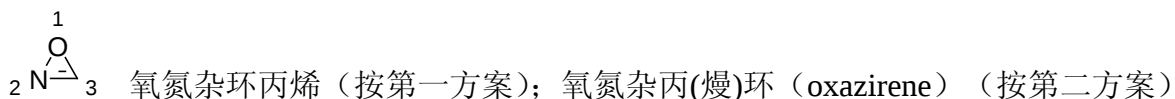
氮杂丙环烷 (曾用名一(氮)丙啶) (aziridine)

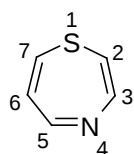


氮杂环丙烯 (1H-azirine) (按第一方案); 氮杂丙(炔)环 (1H-azirine) (按第二方案)

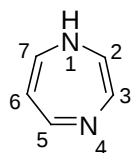


氧杂环丙烯 (按第一方案); 氧杂丙(炔)环 (oxirene) (按第二方案)

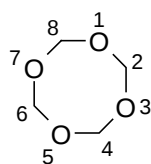




1-硫杂-4-氮杂环庚-2,4,6-三烯 (1-thia-4-azacyclohepta-2,4,6-triene) (按第一方案), 1-硫杂-4-氮杂庚环(慢) (1,4-Thiazepine) (按第二方案)



1,4-二氮杂环庚三烯 (按第一方案); 1,4-二氮杂庚(慢)环 (Diazepine) (按第二方案)



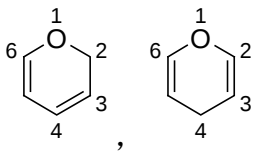
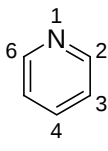
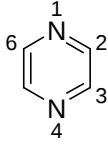
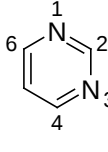
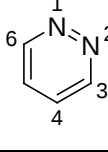
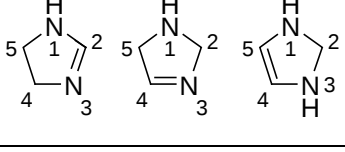
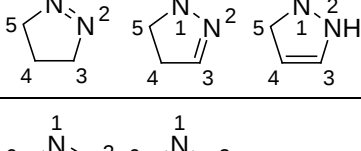
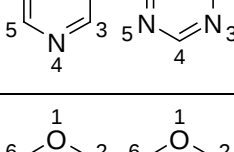
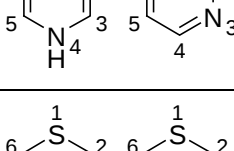
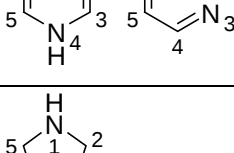
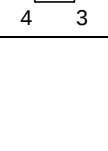
1,3,5,7-四氧杂环辛烷 (1,3,5,7-Tetroxane)

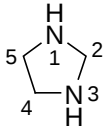
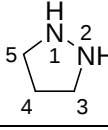
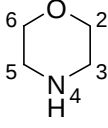
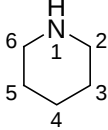
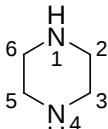
3.3.3.2. 采用俗名的含杂原子单环母体氢化物

由于历史的原因, 含杂原子单环母体氢化物较多采用俗名, 见表 3-5。环上原子编号的规则同 3.3.3.1 节。

表 3-5

编号	结构式	中文名	英文名
1		噻吩	Thiophene
2		呋喃	Furan
3		吡咯	Pyrrole
4		咪唑	Imidazole
5		吡唑	Pyrazole

6		2 <i>H</i> -吡喃, 4 <i>H</i> -吡喃	2 <i>H</i> -Pyran, 4 <i>H</i> -Pyran
7		吡啶	Pyridine
8		吡嗪	Pyrazine
9		嘧啶	Pyrimidine
10		哒嗪	Pyridazine
11		2-咪唑啉, 3-咪唑啉, 4-咪唑啉[注]	2-Imidazoline, 3-Imidazoline, 4-Imidazoline
12		1-吡唑啉, 2-吡唑啉, 3-吡唑啉[注]	1-Pyrazoline 2-Pyrazoline 3-Pyrazoline
13		三嗪	Triazine
14		4 <i>H</i> -1,4-噁嗪 2 <i>H</i> -1,3-噁嗪	Oxazine
15		2 <i>H</i> -1,3-噻嗪 4 <i>H</i> -1,4-噻嗪	Thiazine
16		吡咯烷 (四氢吡咯) [注]	Pyrrolidine

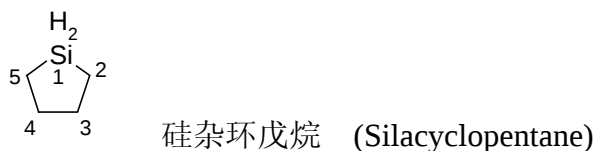
17		咪唑烷[注]	Imidazolidine
18		吡唑烷[注]	Pyrazolidine
19		吗啉[注]	Morpholine
20		哌啶 (六氢吡啶) [注]	Hexahydropyridine Piperidine
21		哌嗪 (1,4-二氮杂环己烷) (六氢吡嗪) [注]	Piperazine

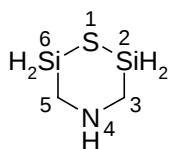
[注] 此类半系统命名或俗名不适用于并环法时的命名。

3.3.3.3. 按置换法命名含杂原子单环母体氢化物

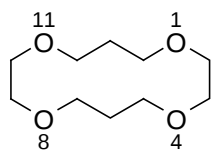
英文中置换法命名通常仅应用于十员以上的含杂原子单环母体氢化物，只对含硅的单环例外。对含最大非累积双键数的单环名称在英文中是将饱和烷烃的词尾‘ane’改成‘ine’即可，如下第 8 例中的 1,8-dioxacyclooctadecine，但也有以轮烯（annulene）作为环名；中文中建议用轮烯作环名外，也可用慢环系统来命名（见 3.3.1.2 节）。当然中英文中也均可采用更详尽的对环的系统命名。环原子的编号则仍按表 3-3 中杂原子的位次进行，以最高位的杂原子起开始编号，再按最低（小）位次组的原则（1.4.4.2 节）接着以下的编号。

例：

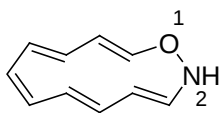




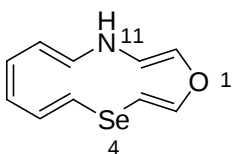
1-硫杂-4-氮杂-2,6-二硅杂环己烷 (1-Thia-4-aza-2,6-disilacyclohexane)



1,4,8,11-四氧杂环十四烷 (1,4,8,11-Tetraoxacyclotetradecane)

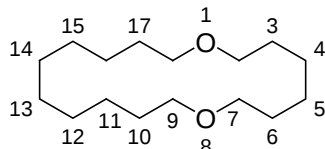


2H-1-氧杂-2-氮杂[12]轮烯 (2H-1-oxa-2-aza[12]annulene); 1-氧杂-2-氮杂-环十二碳-3,5,7,9,11-五烯 (1-oxa-2-aza-cyclododeca-3,5,7,9,11-pentaene)

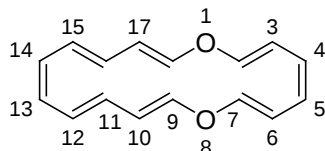


11-H-1-氧杂-4-硒杂-11-氮杂[13]轮烯

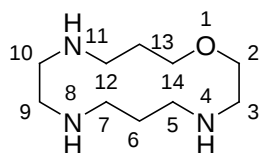
(11-H-1-oxa-4-selena-11-aza[13]annulene); 1-氧杂-4-硒杂-11-氮杂环十三碳-2,5,7,9,12-五烯 (1-oxa-4-selena-11-azacyclotrideca-2,5,7,9,12-pentaene)



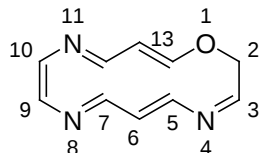
1,8-二氧杂环十八烷 (1,8-dioxacyclooctadecane)



1,8-二氧杂十八(慢)环 (1,8-dioxacyclooctadecine) 1,8-二氧杂环十八碳-2,4,6,9,11,13,15,17-八烯 (1,8-dioxacyclooctadeca-2,4,6,9,11,13,15,17-octaene)



1-氧杂-4,8,11-三氮杂环十四烷 (1-oxa-4,8,11-triazacyclotetradecane)



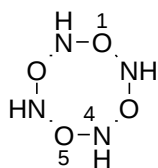
2H-1-氧杂-4,8,11-三氮杂十四(慢)环

(2H-1-oxa-4,8,11-triazacyclotetradecine); 1-氧杂-4,8,11-三氮杂环十四碳-3,5,7,9,11,13-六烯 (1-oxa-4,8,11-triazacyclotetradeca-3,5,7,9,11,13-hexaene)

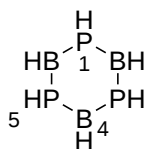
3.3.3.4. 二种杂原子交替成环的命名

对二种杂原子交替形成的环采用高位杂原子烷为词尾，另一杂原子为词头，再冠以前缀‘环’和交替单元数进行命名。

例：



环四氮氧烷 (Cyclotetraazoxane)



环三硼磷烷 (Cyclotriboraphosphane)

3.4. 俗名和半系统命名的多环母体氢化物

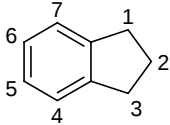
多环母体氢化物，尤其是基本的多环母体氢化物不少具有俗名或半系统名，在这些名称的基础上，再按环的并合方式给出其它多环母体氢化物的命名，详情请参见下几节并（稠）环、螺环和蕃等章节（3.5、3.6、3.7、3.9 节），作为天然产物多环母体氢化物的俗名或半系统名可参考第 8 章天然产物。此外对一些含杂原子的多环母体氢化物在上述命名法外，可采用置换操作法进行命名。

3.4.1. 饱和多环烃母体氢化物

下表（表 3-6）列出一些饱和多环烃母体氢化物俗名或半系统命名。

表 3-6. 俗名或半系统命名的饱和多环烃母体氢化物

编号	结构式	中文名	英文名
1		三棱烷	Prismane
2		立方烷	Cubane
3		五棱烷	Pentaprismane
4		金刚烷	Adamantane

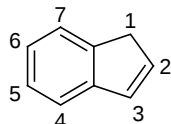
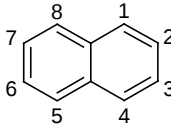
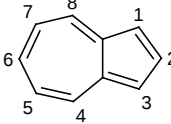
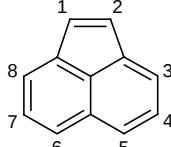
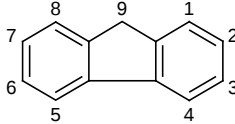
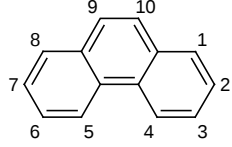
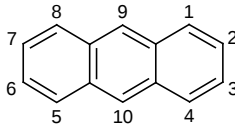
5		茚烷 (茚满)	Indane (Indan)
---	---	---------	----------------

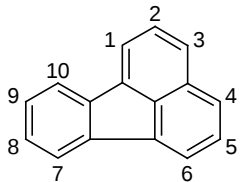
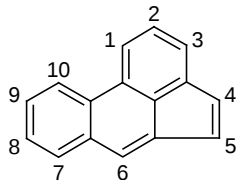
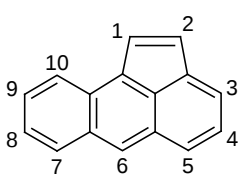
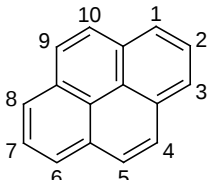
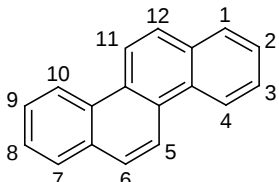
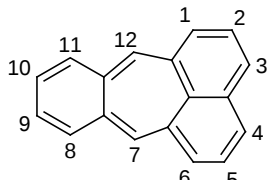
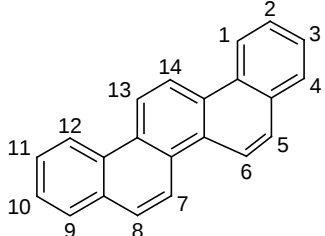
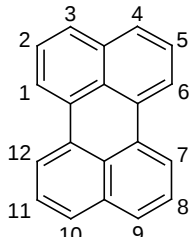
[注] 此类半系统命名或俗名不适用于并环法时的命名。

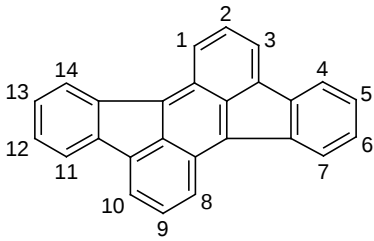
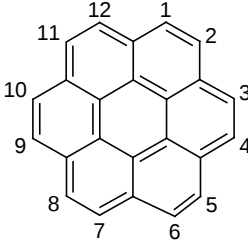
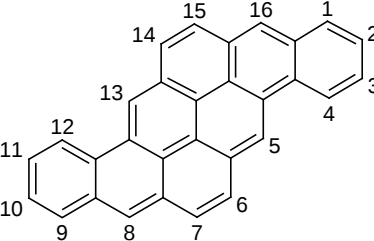
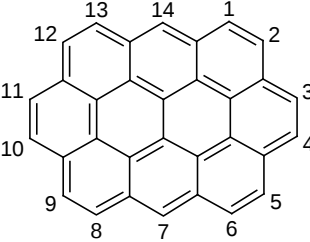
3.4.2. 不饱和多环烃

下表（表 3-7）列出较常见的含最大非累积双键数的不饱和多环烃和它们的俗名或半系统命名。更多作为并环命名时主体的不饱和多环烃见附表一。

表 3-7. 俗名或半系统命名的含最大非累积双键数的不饱和多环烃

编号	结构式	中文名	英文名
1		茚	Indene
2		萘	Naphthalene
3		薹	Azulene
4		茛	Acenaphthylene
5		芴	Fluorene
6		菲 (例外编号系统)	Phenanthrene
7		蒽 (例外编号系统)	Anthracene

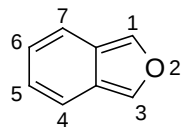
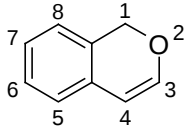
8		苯芴 (荧蒹)	Fluoranthene
9		芴菲	Acephenanthrylene
10		芴蒹	Aceanthrylene
11		芘	Pyrene
12		(卅屈) 芑(qu)	Chrysene
13		昴(mao)苯 (昴星团内有七棵亮星)	Pleiadene (Pleiades-昴星团)
14		芘	Picene
15		芘	Perylene

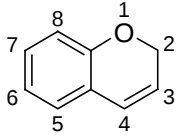
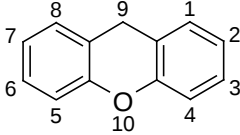
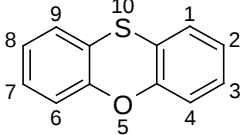
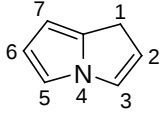
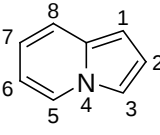
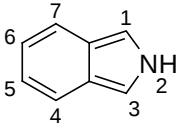
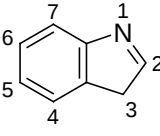
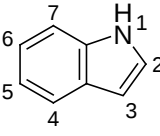
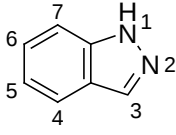
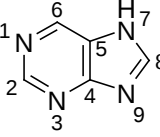
16		茚(hong)	Rubicene
17		冠(guan)	Coronene
18		锥苯	Pyranthrene
19		卵苯	Ovalene

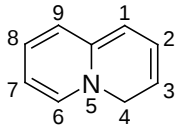
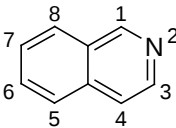
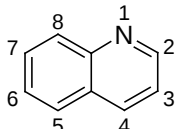
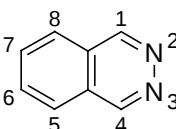
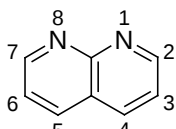
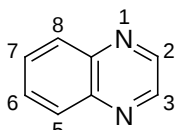
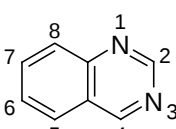
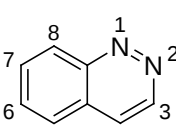
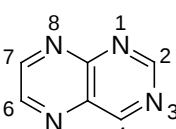
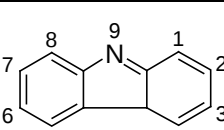
3.4.3. 杂环多环母体氢化物

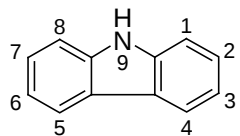
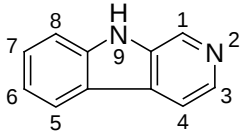
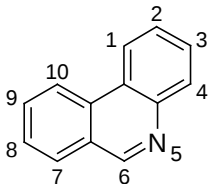
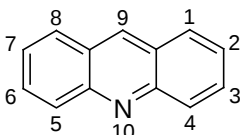
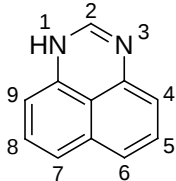
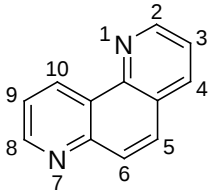
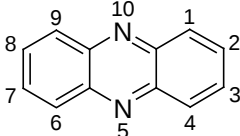
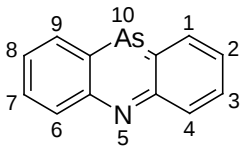
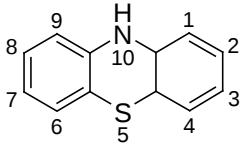
下表（表 3-8）列出较常见的含最大非累积双键数的杂环多环母体氢化物和它们的俗名或半系统命名。更多作为并环命名时主体的杂环母体氢化物见附表二。

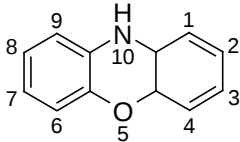
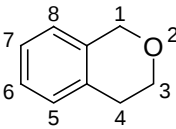
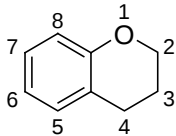
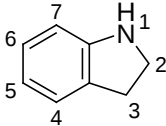
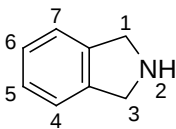
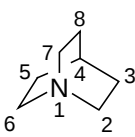
表 3-8. 俗名或半系统命名的含最大非累积双键数的杂环多环母体氢化物

编号	结构式	中文名	英文名
1		苯并[c]呋喃	Isobenzofuran
2		异色烯	Isochromene

3		色烯	Chromene
4		二苯并[<i>b,e</i>]吡喃 (咕吨)	Dibenzo[<i>b, e</i>]pyran Xanthene
5		氧硫杂蒽 (吩噻嗪)	Phenoxathiine Phenoxathin
6		1 <i>H</i> -吡咯嗪	1 <i>H</i> -Pyrrolizine
7		吲哚嗪	Indolizine
8		异吲哚	Isoindole
9		3 <i>H</i> -吲哚	3 <i>H</i> -Indole
10		吲哚	Indole
11		1 <i>H</i> -苯并吡唑 (1 <i>H</i> -吲唑)	1 <i>H</i> -Indazole
12		嘌呤 (例外编号系统)	Purine

13		4 <i>H</i> -喹嗪	4 <i>H</i> -Quinolizine
14		异喹啉	Isoquinoline
15		喹啉	Quinoline
16		苯并[<i>d</i>]哒嗪 (酞嗪)	Phthalazine
17		1,8-二氮杂萘 吡啶并[2,3- <i>b</i>]吡啶 (萘啶)	Naphthyridine
18		苯并[<i>b</i>]吡嗪 (喹喔啉)	Benzo[<i>b</i>]pyrazine Quinoxaline
19		苯并嘧啶 (喹唑啉)	Benzopyrimidine Quinazoline
20		苯并[<i>c</i>]哒嗪 (曾嗪)	Benzopyridazine Cinnoline
21		蝶啶	Pteridine
22		4 <i>aH</i> -咔唑 (例外编号系统)	4 <i>aH</i> -Carbazole

23		咔唑 (例外编号系统)	Carbazole
24		吡啶并[3,4- <i>b</i>]吲哚 (β -咔啉) (例外编号系统)	pyrido[3,4- <i>b</i>]indole β -Carboline
25		苯并[c]喹啉 (菲啉)	Phenanthridine
26		二苯并[<i>b,e</i>]吡啶 (吡啶) (例外编号系统)	Acridine
27		蔡并[1,8- <i>de</i>]嘧啶 (白啉)	Perimidine
28		1,7-二氮杂菲 (菲咯啉)	Phenanthroline
29		二苯并[<i>b,e</i>]吡嗪 (吩嗪)	Phenazine
30		氮砷杂蒽 (二苯并砷嗪)(吩砷嗪)	Phenarsazine
31		硫氮杂蒽(二苯并[<i>b,e</i>]噻嗪) (吩噻嗪)	Phenothiazine

32		氧氮杂蒽（二苯并 [b,e] 噻嗪） (吩噻嗪)	Phenoxazine
33		异色烷[注]	Isochromane
34		色烷[注]	Chromane
35		吲哚啉[注]	Indoline
36		异吲哚啉[注]	Isoindoline
37		奎宁啉[注]	Quinuclidine

[注] 此类半系统命名或俗名不适用于并环法时的命名。

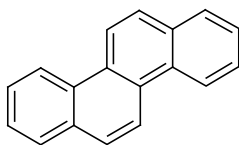
3.5. 并（稠）环母体氢化物

含最大非累积双键数环系的二度空间表示式中，二个相邻环共有二个原子和一根键者称为并环。

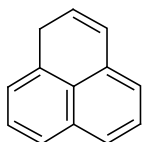
并环中二环或更多环共有的原子称**公共原子**（Fusion atom），并环的外周原子称**周边原子**（Peripheral atom），非外周的公共原子称**内部原子**（Interior atom），与桥相连的原子则为**桥头原子**（Bridgehead atom）。

多环体系中二个相邻环共有并仅有二个相邻原子者称‘**邻位并合**’（Ortho-fused），此场合下体系含 n 个公共环边和 $2n$ 个公共原子；多环体系中一个环与二个或更多环连续邻位并合时称‘**邻—迫位并合**’（Ortho- and peri-fused），此场合下体系含 n 个公共环边和少于 $2n$ 个公共原子。

例：



‘邻位并合’体系： 3 公共边，6 公共原子。



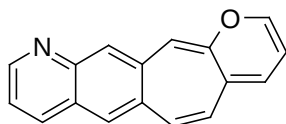
‘邻-迫位并合’体系： 3 公共边，4 公共原子。

组成并环体系的组分（Components of a fused ring system）有主体、拼合体和介体。

主体（曾称母体，Parent component, base component or principle component）：在给定的并环体系中，其各个环组分中按 3.5.1.3 节的标准为最高位的环组分称主体，它的名称为该并环的主称，也即在命名时置于并环名称的最后。作为主体的环可以是单环，也可以是多环。

拼合体（Attached component）：并环的环组分中除主体环外，其它的均称拼合体。在并环命名时，拼合体的名称以前缀的方式加在主体名称前。直接拼合于主体环的为一级拼合体，依次为二级、三级等拼合体，在并环命名时它们的名称作为前缀也依次前置。

例：

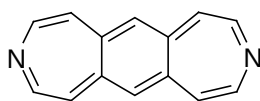


吡喃并[2',3':4,5]庚(熳)环并[1,2-*g*]喹啉
(pyrano[2',3':4,5]cyclohepta[1,2-*g*]quinoline)

其中：主体——喹啉；一级拼合体——庚(熳)环（环庚三烯）；二级拼合体——吡喃。

介体（Interparent component）：二或多个主体以邻位并合或邻-迫位并合方式与同一个拼合体形成并环，此拼合体称为一级介体。如与某类三个拼合体形成并环（见例）则将有二个相同的一级介体和一个二级介体。

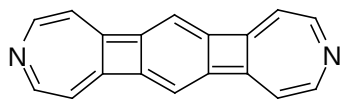
例：



苯并[1,2-*d*:4,5-*d*]二氮杂庚(熳)环

(benzo[1,2-*d*:4,5-*d'*]bisazepine)

其中：主体——氮杂庚(熳)环（氮杂环庚三烯）；介体——苯。



苯并[1'',2'':3,4;4'',5':3',4']二环丁二烯并[1,2-*d*:1',2'-*d'*]二氮杂庚(熳)环
(苯并[1'',2'':3,4;4'',5':3',4']二丁(熳)环并[1,2-*d*:1',2'-*d'*]二氮杂庚(熳)环)

(benzo[1'',2'':3,4;4'',5':3',4']dicyclobuta[1,2-*d*:1',2'-*d'*]bisazepine)

其中：主体——氮杂庚(熳)环（氮杂环庚三烯）；一级介体——环丁二烯（丁(熳)环）；
二级介体——苯。

3.5.1. 并环组分的环系 (Ring systems used as components) 与并环组成环系的高位顺序 (Priority order of component ring systems)

并环的名称由组成它的单环或多环组分的名称构成。

3.5.1.1. 碳氢环组分 (Hydrocarbon components)

可用作主体的基本碳氢环见附表一，这些环是以高位递增方式排列，其中多半为俗名。

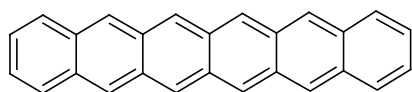
并环命名中的碳氢单环组分系专指含最大非累积双键数的熳环环系 (mancude-ring systems) 单环，除苯以外，作主体时称[*p*]轮烯 ([*p*]Annulene) (*p* 为表示环大小的数字) (见 3.3.1.2)，作为拼合体时不能采用轮烯这一名称，英文中采用环烃名加 a (cycloalka)，如 cyclobuta, cycloocta 等，中文中建议采用表示环大小的天干或十一以上的数字加 ‘(熳)环’ 加并进行命名，通常 ‘熳’ 字省略，如丁(熳)环并，辛(熳)环并等。

并环命名中的碳氢多环组份也专指含最大非累积双键数的熳环，主要的几类有：

(1) 并苯 (Polyacene)

四个苯环以上线性邻位并合的环系总称并苯，各并苯名称中加苯环数的中文数字进行命名。并苯可作主体，也可作拼合体。

例：



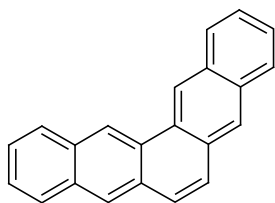
并六苯 (Hexacene)

(2) 芬 (Polyaphene)

n 个邻位并合的苯环 (*n*>3) 组成一 120° 转角的环系，二线性组成为(*n*+1)/2 和(*n*+1)/2 个环 (如 *n* 为奇数) 或 *n*/2 和(*n*/2)+1 个环 (如 *n* 为偶数)，这一类环系称芬，个别芬的

名称用苯环数 n 的中文数字为前缀进行命名。芬可作主体，也可作拼合体。

例：

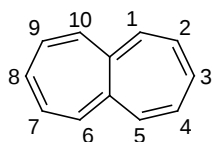


五芬 (Pentaphene)

(3) 同环双拼一并轮 (Polyalene)

二个具有最大累积双键数的单环邻位并合称并轮(烯)，以天干数字加‘轮(烯)’命名，‘烯’字可省略。(将环作慢环(mancude)处理，则可称‘并丙(慢)环’，‘并丁(慢)环’，‘并戊(慢)环’，‘并庚(慢)环’等，‘并己(慢)环’不用，仍称‘萘’。)

例：

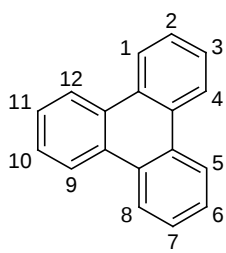


并庚轮(烯) (Heptalene)

(4) 联多苯叉(基) (Polyphenylene)

偶数碳原子的单碳环以邻位方式全部并合上苯环的并环体系，以并合上的苯环数依次命名为联二苯叉(基)，联三苯叉(基)等。命名中‘基’字可省略。

例：

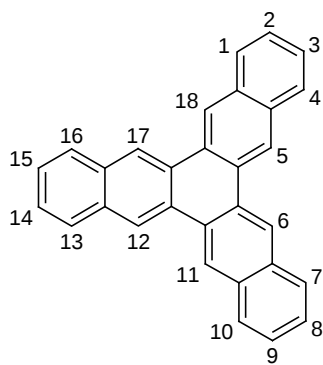


联三苯叉(基) (Triphenylene)

(5) 联多萘叉(基) (polynaphthylene)

偶数碳原子的单碳环以邻位方式全部并合上萘环的并环体系，以并合上的萘环数依次命名为联三萘叉(基)，联四萘叉(基)等。命名中‘基’字可省略。联二萘叉(基)名称不用，而称二苯并[b,h]联二苯叉(基)，且不列入并环基本组成环名录中。

例：

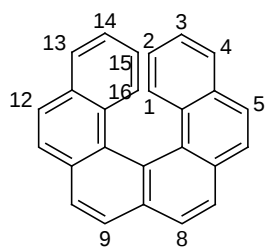


联三萘叉(基) (Trinaphthylene)

(6) 螺旋烃 (Polyhelicene)

邻位并合的多苯并化合物，其中所有的苯环（至少 5 个）均以 120 度转角依次排列，形成螺旋形分子，以苯环数的中文数字为前缀进行命名。螺旋烃周边原子的编号与其它并环略有不同，编号从端环的第一个非公共原子开始，再按顺时针方向进行。

例：

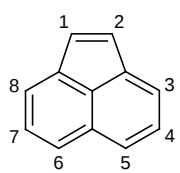


六螺旋烃 (hexahelicene)

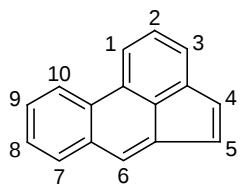
(7) 茚、茚菲和茚蒽 (Ace....ylene)

五员碳(烷)环以邻一迫位并合方式与萘、菲和蒽相并合者称茚、茚菲和茚蒽。

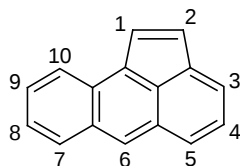
例：



茚 (Acenaphthylene)



茚菲 (Acephenanthrylene)



茚蒽 (Aceanthrylene)

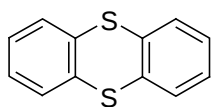
3.5.1.2. 杂环组份 (Heterocyclic components)

可用作主体的基本杂环见附表二，这些环是以高位递增方式排列。其中单杂环组份中有按 Hantzsch-Widman 杂环命名系统命名的单杂环和用俗名的单杂环，多环含氮杂环较多为俗名。其它一些杂环并环按半系统命名法命名：

(1) 二杂蒽 (Heteranthrene)

二个苯环与二个杂相同原子的 1,4-二杂苯并合成的三杂环体系称二杂蒽。属于这类命名的杂原子有 O, S, Se, Te, P, As, Si, B 和 Hg，分别称二氧杂蒽、二硫杂蒽、二硒杂蒽……和二汞杂蒽，英文命名中不加说明二个杂原子的前缀 ‘di’ 字，但中文中我们建议还是加前缀 ‘二’ 字，以免与单杂原子时混淆。二氮杂的类似物则仍按习惯采用俗名吩嗪 (Phenazine) 或系统名二苯并[b,e]吡嗪。

例：

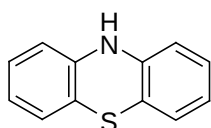


二硫杂蒽 (thianthrene)

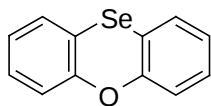
(2) 不同杂原子的杂蒽 (Pheno...ine)

二个苯环与二个不同杂原子的 1,4-二杂苯并合成的三杂环体系采用另一方式命名。英文命名按 IUPAC 是以 1,4-二杂苯的名称为主体名，再冠以苯并词头。中文命名我们建议以二杂原子名加杂蒽进行命名，高位的杂原子名 (参见表 3-3) 在前。

例：



10H-硫氮杂蒽 (10H-phenothiazine)

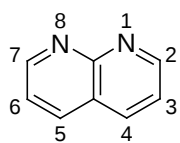


氧硒杂蒽 (Phenoxaselenine)

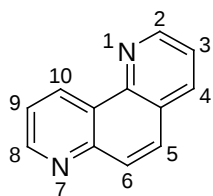
(3) 二氮杂萘和二氮杂菲 (Diazanaphthalene, Diazaphenanthrene)

二个氮原子分别置换在萘的二个环上或菲的二个端环上，在 IUPAC 建议中称为 naphthyridine 或 phenanthroline，中文中曾称吡啶并吡啶 (萘啶) 或菲咯啉，现建议按置换操作法命名，称二氮杂萘或二氮杂菲，氮原子的位置在名称前用数字标明，二氮杂萘的位次按正常规则编号，与菲编号不同。

例：



1,8-二氮杂萘 (1,8-naphthyridine)



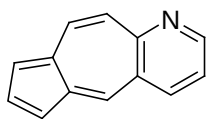
1,7-二氮杂菲 (1,7-phenanthroline)

3.5.1.3. 并环组成环系的高位顺序 (Priority order of component ring systems)

并环命名时主体和拼合体的选择是依据它们的高位顺序，附表一和附表二中环系即按照高位递增的方式排列。如还需选择时可参照下列标准：

(1) 杂环高于碳环。

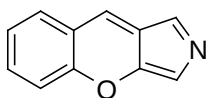
例：



萸并[6,5-*b*]吡啶 (azuleno[6,5-*b*]pyridine)

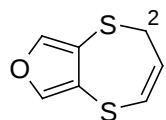
(2) 杂环的高位顺序按其所含杂原子的下述顺序递减：N, F, Cl, Br, I, O, S, Se, Te, P, As, Sb, Bi, Si, Ge, Sn, Pb, B, Hg。除氮外此顺序与 Hantzsch-Widman 命名法的顺序一致（参见 3.3.3.1 节）。

例：



色烯并[2,3-*c*]吡咯 (chromeno[2,3-*c*]pyrrole)

吡咯高于色烯（氮高于氧）。

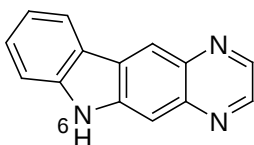


2H-[1,4]二硫杂庚环并[2,3-*c*]呋喃 (2H-[1,4]dithiepine[2,3-*c*]furan)

呋喃高于二硫杂庚环（氧高于硫）。

(3) 环多的高于环少的。

例：

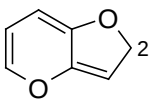


6*H*-吡嗪并[2,3-*b*]咔唑 (6*H*-pyrazino[2,3-*b*]carbazole)

咔唑（三环）多于苯并[*b*]吡嗪（二环）。

（4）环大的高于环小的。

例：

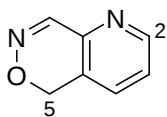


2*H*-呋喃并[3,2-*b*]吡喃 (2*H*-furo[3,2-*b*]pyran)

吡喃（六员环）高于呋喃（五员环）。

（5）含任何种杂原子数目多的优先。

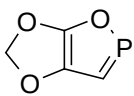
例：



5*H*-吡啶并[2,3-*d*][1,2]噁嗪 (5*H*-pyrido[2,3-*d*][1,2]oxazine)

噁嗪高于吡啶。

（6）含杂原子种类多的优先。



[1,3]二氧杂戊环并[*d*][1,2]氧杂磷杂戊环

([1,3]dioxolo[*d*][1,2]oxaphosphole)

O 和 P 优先于仅有 O。

3.5.2. 并环名称的构词 (Construction of fusion names)

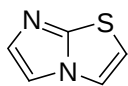
具有最大非累积双键数的邻位并合或邻一迫位并合多环体系，又无已公认的俗名或半系统命名时，采用加连缀字‘并’的并（稠）环命名法进行命名。选出此环系中已有俗名或半系统名称的高位组分为此环系名的主体，再以其余部分的环系为拼合体，加连缀字‘并’构成此环系母体氢化物的名称。以下的构词规则适用于无桥的邻位并合或邻一迫位并合体系。

3.5.2.1. 环组份的选择 (Selection of component(s))

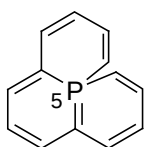
环组份选择的次序为先选择出主体环，然后一级拼合体环和二级拼合体环。如杂原

子在二个环的公用键上，则应认为二环均含有此杂原子；如环组份中含有非标准成键数的中性骨架原子，则应以符号 λ^n 来标明。

例：



咪唑并[2,1-*b*][1,3]噻唑 (imidazo[2,1-*b*][1,3]thiazole)



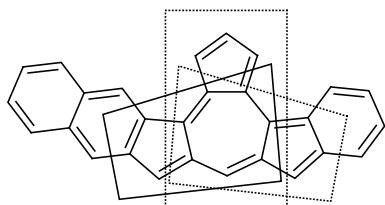
5 λ^5 -磷杂苯并[2,1-*d*]磷啉嗪 (5 λ^5 -phosphinino[2,1-*d*]phosphinolizine)

3.5.2.2. 主体环组份的选择 (Selection of parent component(s))

并环中主体环选择的标准主要见 3.5.1.3.并环组成环系的高位顺序节，位高者为主体，当有几种划分方式都可以得到此同一主体环系时，则可按照以下标准逐条依次进一步选择。

(1) 选择的主体划分方式命名时应尽量不使用多级的拼合体。

例：



戊环并[*h*]茛并[2,1-*f*]萘并[2,3-*a*]薹

(cyclopenta[*h*]indeno[2,1-*f*]naphtha[2,3-*a*]azulene)，此时无二级拼合体。

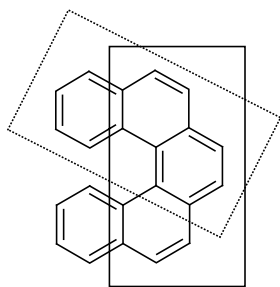
而不是：苯并[*a*]苯并[5,6]茛并[2,1-*f*]戊环并[*h*]薹或苯并[5,6]茛并[1,2-*e*]茛并[2,1-*h*]薹

(benzo[*a*]benzo[5,6]indeno[2,1-*f*]cyclopenta[*h*]azulene or

benzo[5,6]indeno[1,2-*e*]indeno[2,1-*h*]azulene)

(2) 选择的主体划分方式命名时应包括尽量多的一级拼合体。

例：

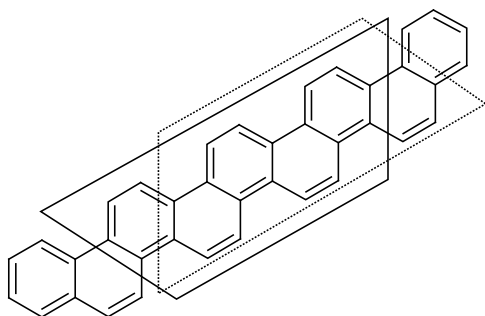


二苯并[*c,g*]菲 (dibenzo[*c,g*]phenanthrene)

而不是：萘并[2,1-*c*]菲 (naphtho[2,1-*c*]phenanthrene)

(3) 优先用尽量多的相同的一级拼合体。

例：



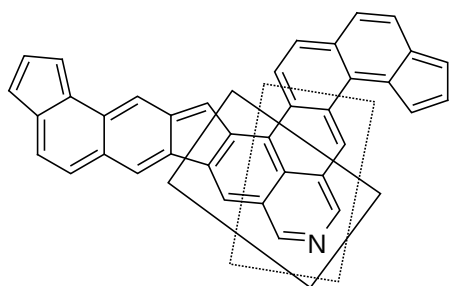
二萘并[1,2-*c*:2',1'-*m*]苈

(dinaphtho[1,2-*c*:2',1'-*m*]picene)

而不是：苯并[*c*]菲并[2,1-*m*]苈 (benzo[*c*]phenanthro[2,1-*m*]picene)

(4) 比较不同主体划分方式时的一级拼合体高位情况，采用拼合体位高的主体划分方式；如相同则再依次比较二级拼合体，三级拼合体等。

例：



戊环并[5,6]菲并[3,2,1-*de*]茛并[4'5':5'6]茛并[2,1-*g*]

异喹啉 (cyclopenta[5,6]phenanthro[3,2,1-*de*]indeno[4'5':5'6]indeno[2,1-*g*]isoquinoline)

而不是：戊环并[7,8]萘并[2,1-*g*]茛并[5',4':6,7]茛并[3,2,1-*de*]异喹啉

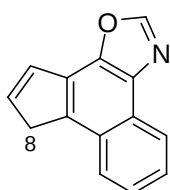
(cyclopenta[7,8]naphtho[2,1-*g*]indeno[5',4':6,7]fluoreno[3,2,1-*de*]isoquinoline)

(拼合体菲高于茛)

3.5.2.3. 拼合体环组份的选择 (Selection of attached component(s))

并环中的主体环组份确定后其它的环应尽可能划分为拼合体组份。如对一级拼合体有几种不同选择时, 则按 3.5.1.3. 节的环高位标准采用优先的拼合体划分。

例:



8*H*-戊环并[3,4]萘并[1,2-*d*][1,3]噁唑

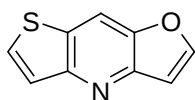
(8*H*-cyclopenta[3,4]naphtha[1,2-*d*][1,3]oxazole)

而不是: 8*H*-苯并[6,7]茚并[5,4-*d*][1,3]噁唑 (8*H*-benzo[6,7]indeno[5,4-*d*][1,3]oxazole)

3.5.2.4. 并环命名构词时前缀排列顺序 (Order of citation of fusion prefixes)

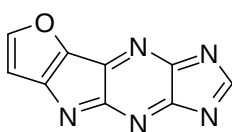
二个组份间的拼合标识方法见 3.5.3 节, 拼合体的名称在主体名前, 二级拼合体的名称在一级拼合体前, 并依此类推。如有多个不同的拼合体并合在同一环组份上时, 英文中按拼合体的字母顺序前后排列, 中文中建议也按英文排列, 与 IUPAC 命名一致。

例:



呋喃并[3,2-*b*]噻吩[2,3-*e*]并吡啶 (furo[3,2-*b*]thieno[2,3-*e*]pyridine – furo-

在 thieno- 前)



呋喃并[2',3':4,5]吡咯并[2,3-*b*]咪唑并[4,5-*e*]吡嗪

(furo[2',3':4,5]pyrro[2,3-*b*]imidazo[4,5-*e*]pyrazine – furo-, pyrrolo- 在 imidazo- 前)

3.5.3. 并环命名构词时并合位置的标识 (Fusion Descriptors)

并环中主体和拼合体组份确定后, 进一步是如何标识它们并合时的共有键。

3.5.3.1. 并环中主体环组份周边的标识

主体环组份的周边由原子编号 1 开始依次以斜体小写的拉丁字母进行标记, 即以 *a* 标记边 1,2; *b* 标记 2,3 (或 2,2*a*) 等等, 对蒽等例外编号环系仍采用通常的编号系统。

如边数超过 26 时采用 $a_1, b_1, c_1, \dots$, 然后 $a_2, b_2, c_2, \dots$ 。

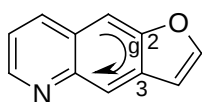
3.5.3.2. 并环中拼合体环组份周边的位次标识

拼合体环组份的周边由该边的一对原子编号数字来标记。

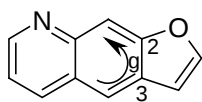
3.5.3.3. 一级拼合体与主体并合的标识

标识并合的共有键用该键在拼合体中的数字编号, 再以短横连以在主体中的字母标记, 外加方括号, 数字编号间加逗号, 字母标记间不分开。数字和字母的前后次序按两环并合时主体环的方向 (即附录一、二中所示的顺时针方向)。如有多个拼合体时它们的排列次序见 3.5.2.4 节。

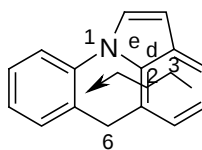
例:



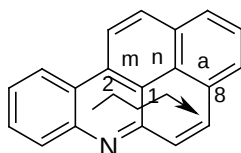
呋喃并[2,3-*g*]喹啉 (furo[2,3-*g*]quinoline)



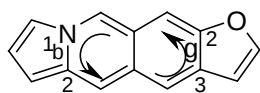
呋喃并[3,2-*g*]喹啉 (furo[3,2-*g*]quinoline)



6*H*-吡咯并[3,2,1-*de*]吖啶 (6*H*-pyrrolo[3,2,1-*de*]acridine)



萘并[2,1,8-*mna*]吖啶 (naphtha[2,1,8-*mna*]acridine)



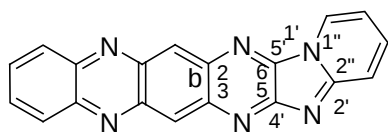
呋喃并[3,2-*g*]吡咯[1,2-*b*]并异喹啉

(furo[3,2-*g*]pyrrolo[1,2-*b*]isoquinoline)

3.5.3.4. 拼合体进一步并合时的位次标识

当拼合体再并合至已与主体并合的一级拼合体时, 采用数字编号来标识它们的共有键, 后加拼合体的编号在前, 一级拼合体的编号在后, 中间用冒号分开, 外加方括号。此标识方法可应用于拼合体的进一步并合, 仅二级拼合体的数字编号上加撇, 三级拼合体的数字编号上加二撇, 如此等等。

例：

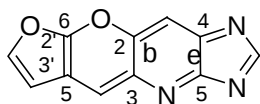


吡啶并[1'',2'':1',2']咪唑并[4',5':5,6]吡嗪并[2,3-*b*]吩嗪

(pyrido[1'',2'':1',2']imidazo[4',5':5,6]pyrazino[2,3-*b*]phenazine)

如有二个以上的一级拼合体再并合上拼合体时，它们名称的排列次序见 3.5.2.4 节。

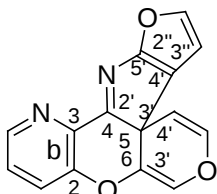
例：



呋喃并[3',2':5,6]吡喃并[3,2-*b*]咪唑并[4,5-*e*]吡啶

(furo[3',2':5,6]pyrano[3,2-*b*]imidazo[4,5-*e*]pyridine)

(呋喃—吡喃在咪唑前)



呋喃并[3'',2'':4',5']吡咯并[2',3':4,5]吡喃并[4',3':5,6]吡喃并[3,2-*b*]吡啶

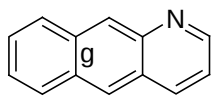
(furo[3'',2'':4',5']pyrrolo[2',3':4,5]pyrano[4',3':5,6]pyrano[3,2-*b*]pyridine)

(呋喃—吡喃在吡喃前)

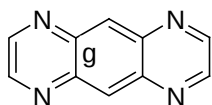
3.5.3.5. 并合位置标识的省略

对仅有一级拼合体的环系，如数字和/或位置标识省略时不会引起混淆时。

例：



苯并[*g*]喹啉 (benzo[*g*]quinoline)

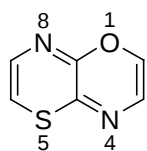


吡嗪并[*g*]喹喔啉 (pyrazino[*g*]quinoxaline)

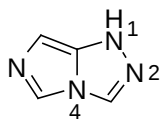
3.5.3.6. 并环组份中杂原子位次的标识

当并环组份的名称中需标明杂原子的位次时，可在其名称前加方括号来表示，此位次数字表示该组份在组成并环前的位次编号。

例：



[1,4]噻嗪并[3,2-*b*][1,4]噁嗪 ([1,4]thiazino[3,2-*b*][1,4]oxazine)



1*H*-咪唑并[5,1-*d*][1,2,4]三唑 (1*H*-imidazo[5,1-*d*][1,2,4]triazole)

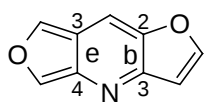
3.5.3.7. 并环命名中相同拼合体的处理

如有二个或二个以上的环组份同时并合于一母体或拼合体环组份时，可在该组份名前加前缀二、三等来表示，必要时为免于混淆可使用双、叁等表示。此复数前缀不影响该拼合体的排序。

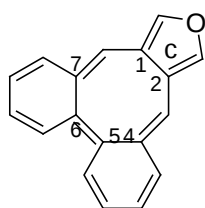
如为一级拼合体并合至母体，且无省略时每组位次标识用冒号分开；如省略拼合体的数字位次时，则母体的字母位次间用逗号分开。如为拼合体并合至上一级拼合体时，无省略时每组位次标识用分号分开；如有省略时则用冒号分开。

为区别同一级的拼合体，第二个拼合体的位次编号加撇，第三个拼合体加二撇，依次类推。

例：



二呋喃并[3,2-*b*:3',4'-*e*]吡啶 (difuro[3,2-*b*:3',4'-*e*]pyridine)



二苯并[4,5:6,7] 辛环并[1,2-*c*]呋喃

(dibenzo[4,5:6,7]cycloocta[1,2-*c*]furan)

3.5.4. 编号 (Numbering)

一些以俗名命名的并环化合物和并环的天然产物有各自的原子编号方法，它们的编号见附录和第 8 章天然产物。按并环命名的并环环系则先将它们的环系结构按规定格式在二维空间中表达，然后编号。

3.5.4.1. 并环系的画法

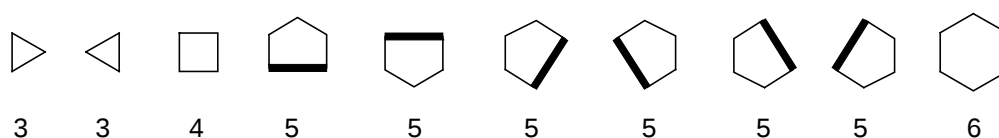
并环体系周边原子的编号规定为由顶端环开始，按顺时针方向编定。因此首先需对环的画法和整个环系的排列取向作出规范。

（这一环系的画法和排列取向是为确定环上原子的编号之用，应当允许在其它场合下采用不同的画法和取向。）

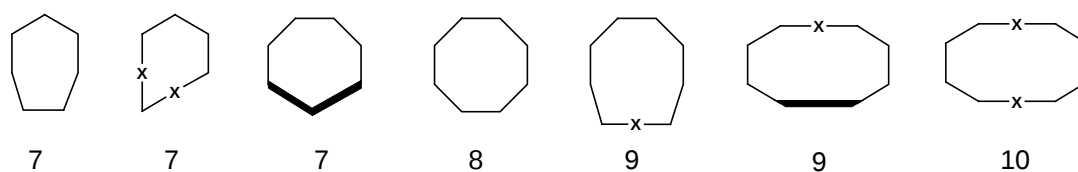
（1）为横向并合的环组份的画法

要求并环系的排列取向应有尽可能多的环在一横向轴上（参见下节），为此各种大小的环参照正六边形环画成以下形状：

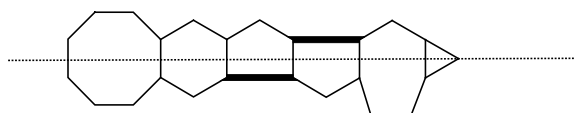
三至六员环：



七、八员环及更大环：



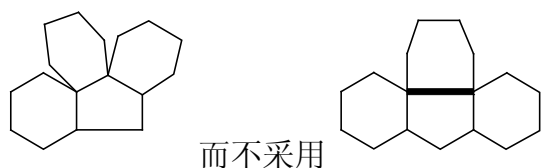
例：横轴上并合后的形式

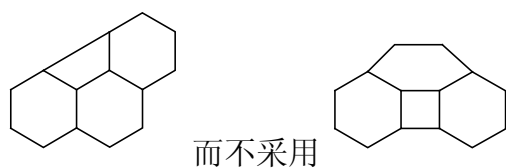


（2）并环画法上的一些选择

当并环的画法有几种可能时，应选择并合边为环的非加长边（环中的未加粗边）的图式。在画并环时应尽可能采用上述标准画法，如其中有环组份不能采用，而须加以变形时，则尽量改变较小的环。

例：





而不采用

（前者四员环变形，后者六员环变形）

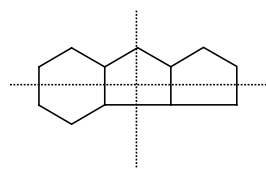
3.5.4.2. 并环系图形的排列取向

为给并环编号，必须先将按上述环画法规范画出的图形，按下列步骤确定出一标准的排列取向。应当说明的是在此排列过程中，这一图形可在平面上旋转和翻转，而不会影响它所表示的并环体系。

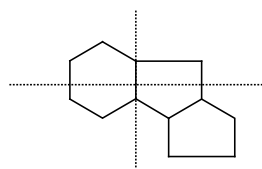
（1）安排成在一横排上环数最多

首先将图形安排成在一横排上邻位并环的环数最多，此时可作一横轴（水平轴）平分邻位并环的并合边（公共键），并取其中点作一纵轴，形成一二度空间的坐标。被横轴贯穿的环如不是直接邻位并合的，则不计入此横轴上的环数中。

例：



（横轴上 3 环）而不排列成

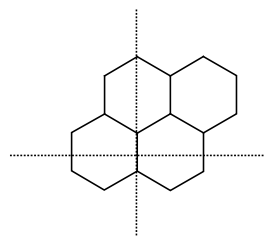


（横轴上 2 环）

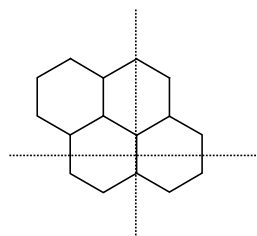
（2）安排成右上区（第一象限）环数最多

进一步将图形安排成右上区（第一象限）环数最多，这时横、纵轴贯穿的环作半个环计。

例：



（右上区 2 环）而不排列成



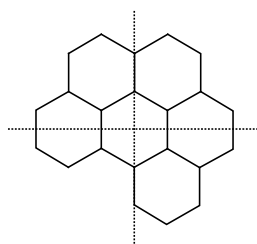
（右上区 1 环）

（3）安排成左下区（第三象限）环数最少

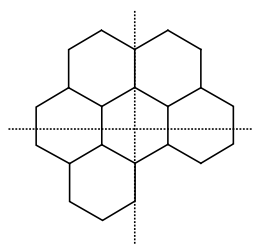
在右上区（第一象限）环数相同的几种可能排列中，选择左下区（第三象限）环数

最少的安排。

例：



（左下区 0.75 环）而不排列成

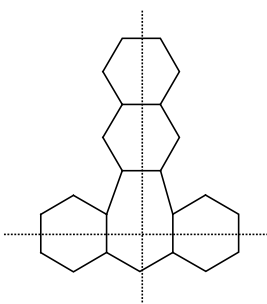


（左下区 1.75 环）

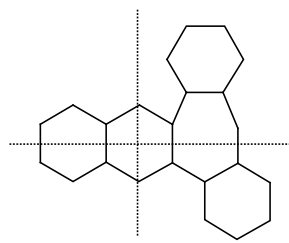
（4）安排成上半区（第一、四象限）环数最多

按上述规定仍未能确定时，则选择上半区（第一、四象限）环数最多的安排。

例：



（上半区 3.5 环） 而不排列成



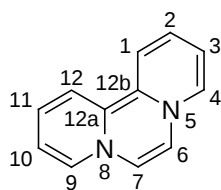
（上半区 2.5

环）

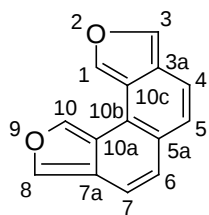
3.5.4.3. 并环周边原子编号

并环周边原子编号从按上节规范排列中最顶端的环开始，如有多个环时则从其中最右端的环，并从此环反时钟计最远的非公共原子开始，再按顺时针方向计数，包括周边的公共杂原子。周边的公共碳原子则不进入数字编号内，而以前一碳原子的数字编号加拉丁字母 a, b, c 等来标识。如用置换命名法命名的含杂原子并环，则仍采用原碳环时的编号。

例：



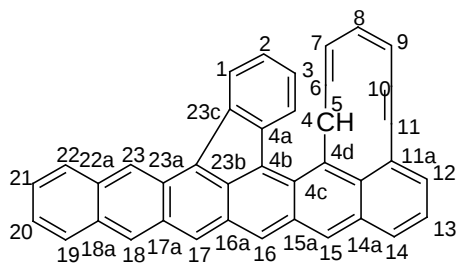
二吡啶并[1,2-a:2',1'-c]吡嗪 （dipyrido[1,2-a:2',1'-c]pyrazine）



蔡并[1,2-*c*:7,8-*c'*]二呋喃 (naphtho[1,2-*c*:7,8-*c'*]difuran)

顶端环的考虑中不计及环大小造成的几何高度，而计算由横轴向上并合环的层次。

例：

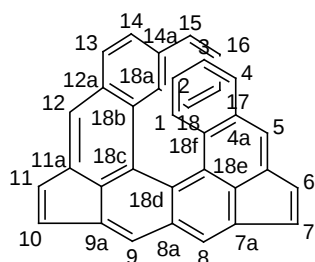


5*H*-癸环并[*de*]茛并[1,2,3-*hi*]并六苯

(5*H*-cyclodeca[*de*]indeno[1,2,3-*hi*]hexacene)

如有环重叠交盖时，则选择并合至最右端环的那一个环开始编号。

例：

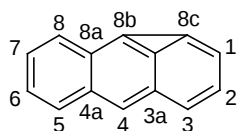


二戊环并[*gh,mn*]七螺旋烃

(dicyclopenta[*gh,mn*]heptahelicene)

如所选的环上无非公共的原子，则编号计数由顺时针方向下一环开始。

例：



丙环并[*de*]蒽 (cyclopropa[*de*]anthracene)

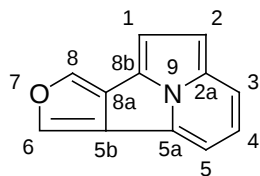
3.5.4.4. 并环内部原子编号 (Interior numbering)

(1) 杂原子

内部杂原子（非置换法命名的杂原子）的编号是接着外周原子编号后编排。如有先

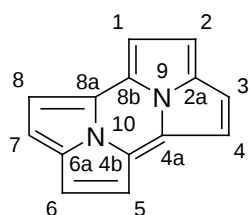
后时，则按与其相距键数最短的外周原子编号决定，与较低编号外周原子接近的杂原子编号在先。

例：



呋喃并[3,4-*c*]吡咯并[2,1,5-*cd*]吲哚嗪

(furo[3,4-*c*]pyrrolo[2,1,5-*cd*]indolizine)



吡嗪并[2,1,6-*cd*:3,4,5-*c'd'*]二吡咯嗪

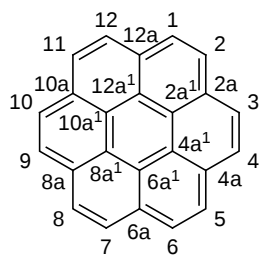
(pyrazino[2,1,6-*cd*:3,4,5-*c'd'*]dipyrrolizine)

(9-N 接近 2a; 10-N 接近 4a)

(2) 碳原子

内部碳原子的编号系取决于与其相距键数最短的外周原子，它的位次采用该外周原子的编号，再加以它们间相连的键数为上标。

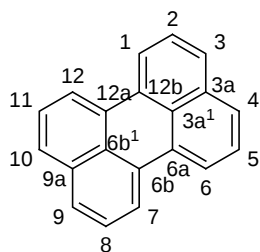
例：



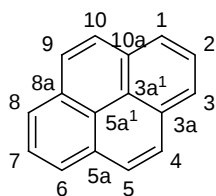
蔻(guan) (coronene)

如有几种编号可能时，则采用其中数字较小者。

例：



花 (perylene)



芘 (pyrene)

3.5.5. 带桥的并环体系 (Bridged fused ring systems)

多环体系中除含有‘邻位并合’和‘邻-迫位并合’的环系外，尚存在有桥连的结构，此时需采用该体系中的基本并环体系的名称，再加桥的名称和位次来命名。

3.5.5.1. 带桥的并环体系中基本并环和桥的选择

在环系中确定基本并环和桥时，依次选择含最多环的基本并环，如环数相同时再选择骨架原子最多的并环，选择杂原子数最少的并环，杂原子数字位次组低的并环；以及选择含最多的非累积双键数的环；而桥的数目则尽可能最少，多价桥、复合桥更少。

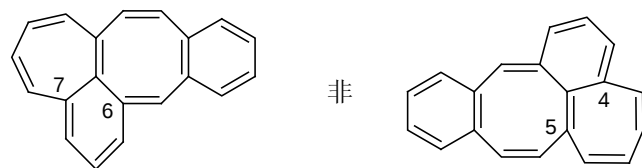
例：



1*H*-1,3-丙桥丁环并[*a*]茚 (1*H*-1,3-propanocyclobuta[*a*]indene)

而非 8,10,1-(乙[1,1,2]爪基)苯并[8]轮烯 (8,10,1-(ethane[1,1,2]triyl)benzo[8]annulene)

(选择含最多环的基本并环)



6,7-(丙[1]烯[1]基[3]亚基)苯并[*a*]庚环并[*e*][8]轮烯

(6,7-(prop[1]en[1]yl[3]ylidene)benzo[*a*]cyclohepta[*e*][8]annulene)

而非 4,5-丁[1,3]二烯桥二苯并[*a,d*][8]轮烯 (4,5-buta[1,3]dienodibenzo[*a,d*][8]annulene)

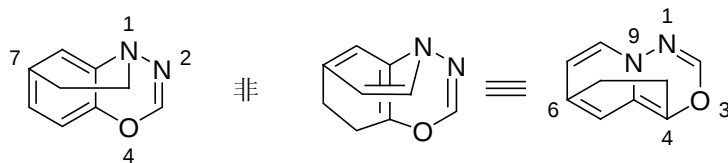
(选择骨架原子最多的并环)



1,3-氧桥萘 (1,3-epoxynaphthalene)

而非 1,3-(甲基亚基)异色烯 (1,3-(metheno)isochromene)

(选择杂原子数最少的并环)



1,7-乙桥[4,1,2]苯并氧二氮杂己环 (1,7-ethano[4,1,2]benzoxadiazine)

而非 4,6-乙桥吡啶并[1,2-*d*][1,3,4]氧二氮杂己环

(4,6-ethanopyrido[1,2-*d*][1,3,4]oxadiazine)

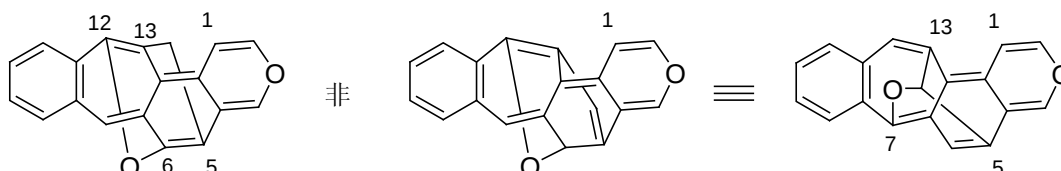
(杂原子数字位次组 1,2,4 低于 1,3,9)



1,4-二氢-1,4-乙桥蒽 (1,4-dihydro-1,4-ethanoanthracene)

而非 1,2,3,4-四氢-1,4-乙烯桥蒽 (1,2,3,4-tetrahydro-1,4-ethenoanthracene)

(选择含最多的非累积双键数的并环)



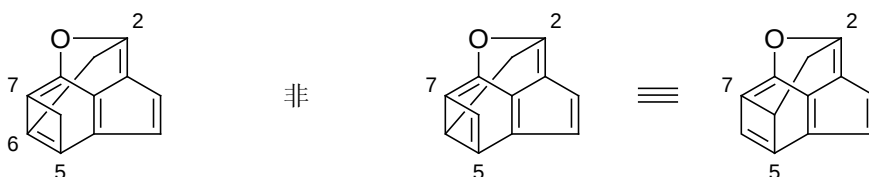
6,12-氧桥-5,13-甲桥苯并[4,5]庚环并[1,2-*f*]异色烯

(6,12-epoxy-5,13-methanobenzo[4,5]cyclohepta[1,2-*f*]isochromene)

而非 7,5,13-(氧甲爪基)苯并[4,5]庚环并[1,2-*f*]异色烯

(7,5,13-(epoxymethanetriyl)benzo[4,5]cyclohepta[1,2-*f*]isochromene)

(选择非多价桥、复合桥)



2,6:5,7-二甲桥茛并[7,1-*bc*]呋喃 (2,6:5,7-dimethanoindeno[7,1-*bc*]furan)

而非 5,7,2-(乙[1,1,2]爪基)茛并[7,1-*bc*]呋喃 (5,7,2-(ethane[1,1,2]triyl)indeno[7,1-*bc*]furan)

(选择非多价桥)

3.5.5.2. 带桥并环体系中桥的命名

(1) 简单的二价桥

以单键连接并环体系的不含杂原子的桥。

非环碳氢链成桥者以碳氢链名加桥命名，烷字省略，双键位置用方括号标明。

例：

-CH₂- 甲桥 (methano)

-CH₂CH₂CH₂- 丙桥 (propano)

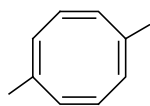
-CH=CHCH₂CH₂- 丁[1]烯桥 (but[1]eno)

非苯环的碳氢单环成桥者，与并环中拼合体同样作为含最大非累积双键数的环对待，但词尾加桥，与并环连接位用方括号标明。

例：



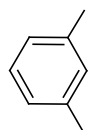
[1,2]戊环桥 ([1,2]epicyclopenta)



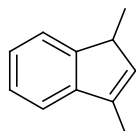
[1,5]辛环桥 ([1,5]epicycloocta)

其它的碳氢环以附录一的俗名或半系统命名加桥给予命名，与并环连接位用方括号标明。

例：



[1,3]苯桥 ([1,3]benzeno)



[1,3]茛桥 ([1,3]epindenone) (茛桥中的额外氢需在完整命名中标明)

非环杂原子桥以杂原子名加桥命名，非标准价键的杂原子加符号 λ^n 来标明。

例：

-O- 氧桥 (epoxy)

-OO- 过氧桥 (epidioxy)

-S- 硫桥 (epithio)

-SS- 二硫桥 (epidithio)

-SH₂- λ^4 -硫桥 (λ^4 -sulfano)

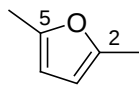
-NH- 氨桥 (亚氨桥) (epiimino (imino))

-NHNH- 二氨桥 (胼桥) (diazano (biimino))

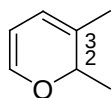
-N=N- 二亚氨桥 (偶氮桥) diazeno (azo)

杂环以附录二的俗名或半系统命名加桥给予命名，与并环连接位用方括号标明。

例：



[2,5]呋喃桥 ([2,5]furano)



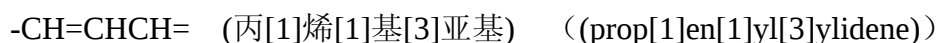
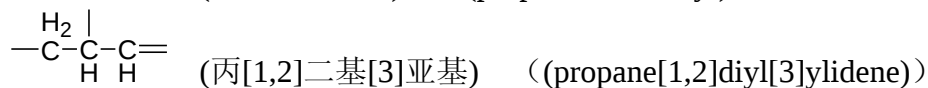
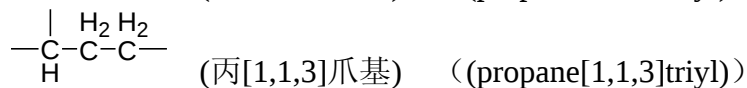
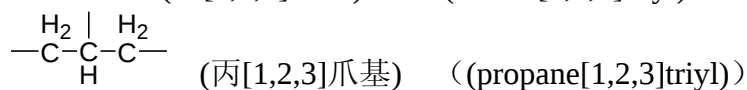
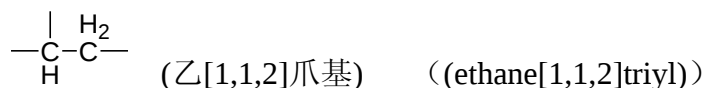
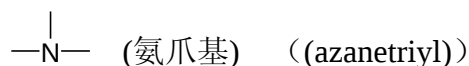
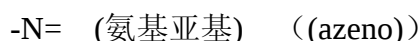
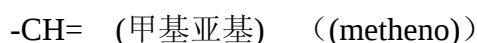
[2,3]吡喃桥 ([2,3]epipyrano)



(2) 简单的多价桥

以三或以上单键或相当的重键连接并环体系的不含杂原子的桥，以取代基方式命名，并外加括号，不加连缀字‘桥’。

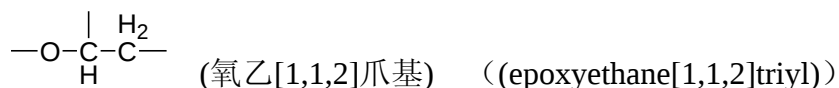
例：

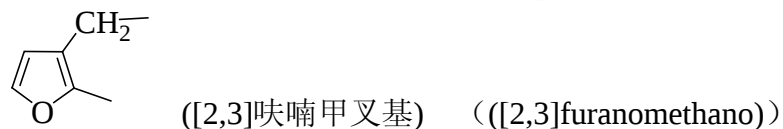
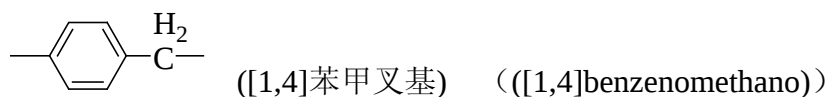


(3) 复合桥 (Composite bridge)

由多种原子连续构成的桥或环链均有的桥，以取代基方式命名，并外加括号，不加连缀字‘桥’。

例：

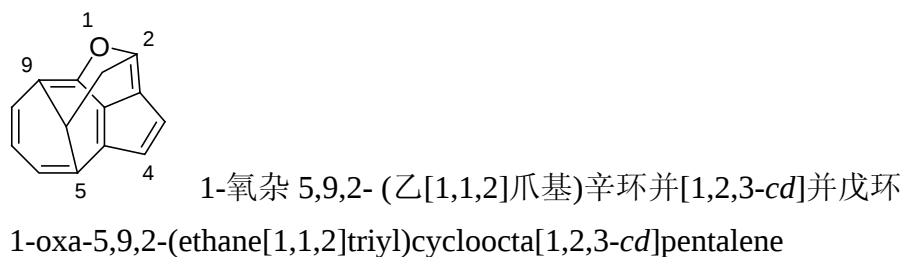
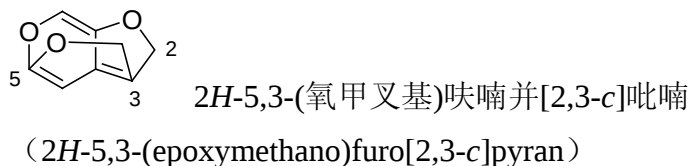
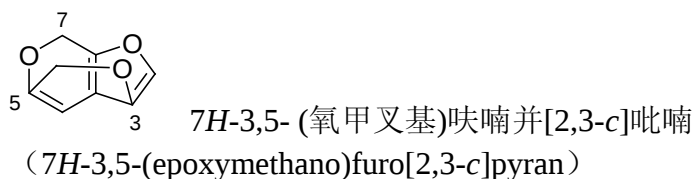
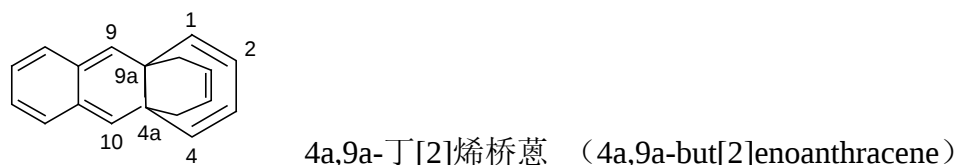




3.5.5.3. 带桥并环体系的命名

带桥并环体系的命名采用桥名加并环名的方式，桥名前标出桥端在并环中的位置，不对称桥时，桥本身编号小的桥端的位置在先。

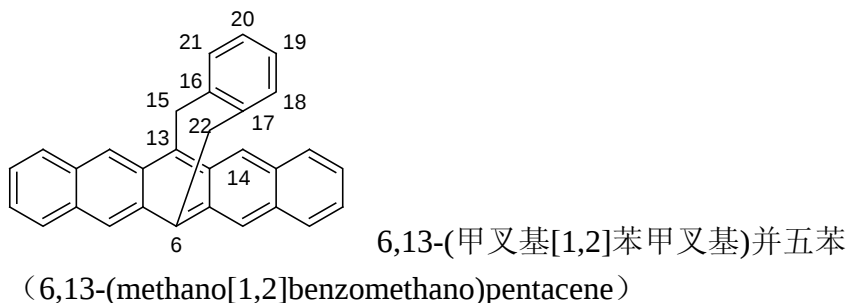
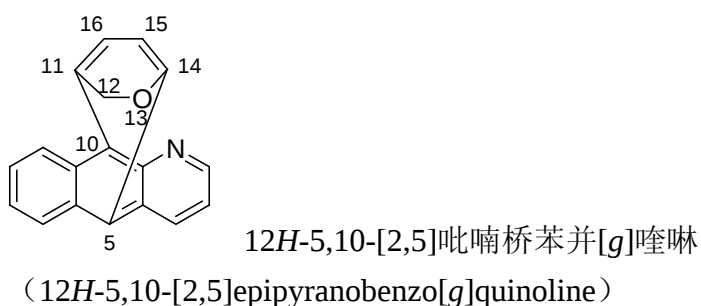
例：

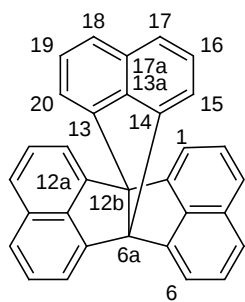


3.5.5.4. 带桥并环体系中桥原子的编号

带桥并环体系中桥上原子的编号接着并环中最高编号数起编，由接近最高编号数的桥头开始。带环的桥如有杂原子时，选择使其编号数小的次序，否则则先编另一桥头的原子，然后依次编号。

例：



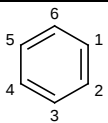
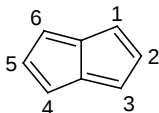
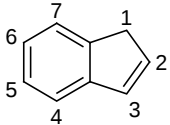
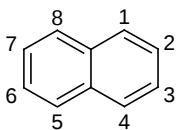
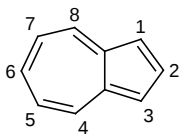
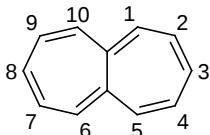
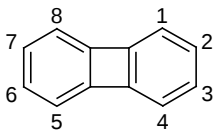


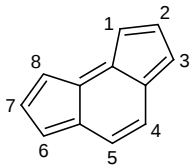
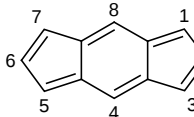
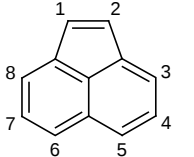
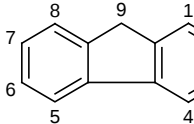
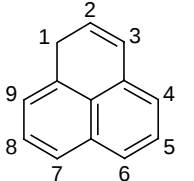
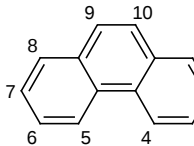
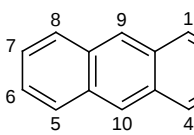
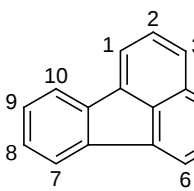
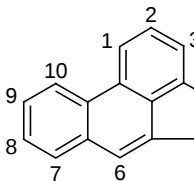
6b,12b-[1,8]萘桥茚并[1,2-*a*]茚

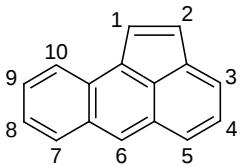
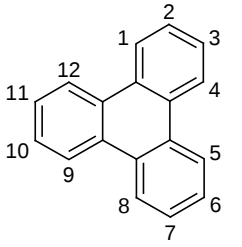
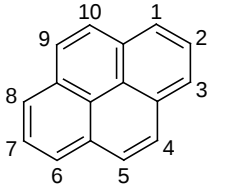
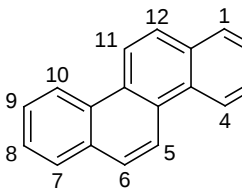
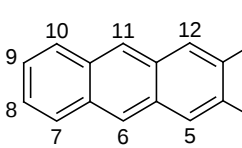
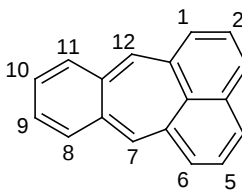
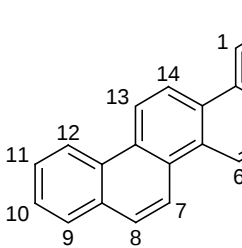
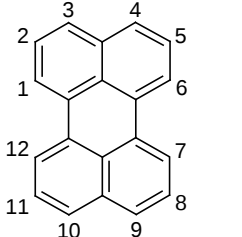
(6b,12b-[1,8]naphthalenoacenaphthylene[1,2-*a*]acenaphthylene)

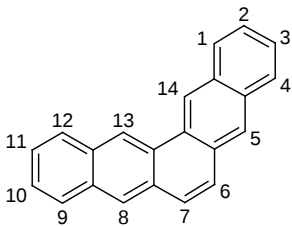
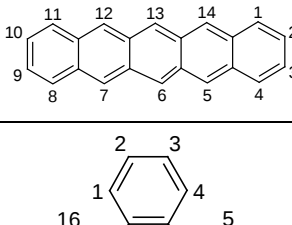
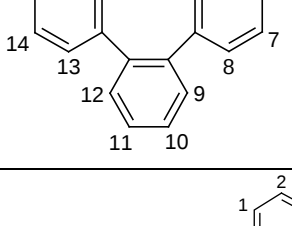
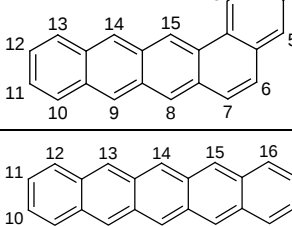
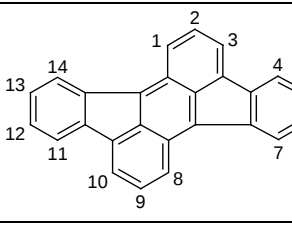
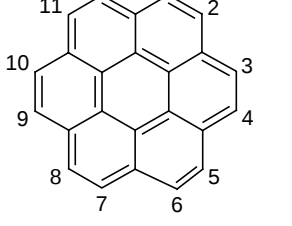
附表一 并环法命名用基本碳环

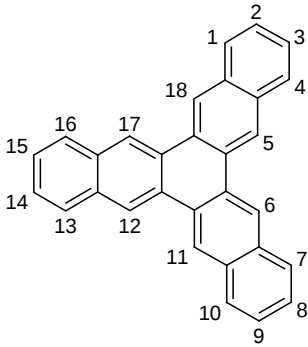
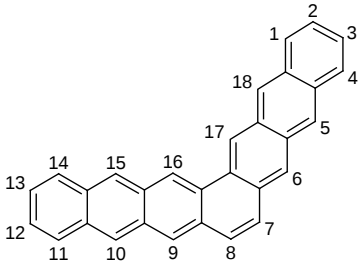
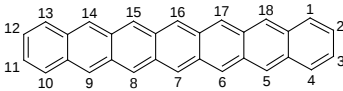
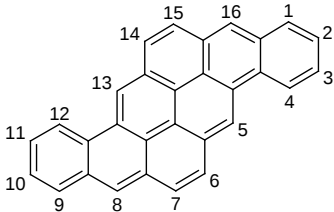
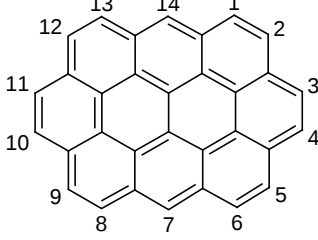
并环命名时基本碳氢环的扩展表，按高位优先次序排列，排列在后者为主体，在前者为拼合体，也即在并环的名称中拼合体的名称在前，主体名称在后，中间加连缀字‘并’。

编号	结构式	中文名	英文名	注
1	C_p ($p < 6$)	[p]轮烯 ($p < 6$)	[p]Annulene	注[1]
2		苯	Benzene	
3	C_p ($p > 6$)	[p]轮烯 ($p > 6$)	[p]Annulene	注[2]
4		并戊(炔)环 (并环戊二烯)	Pentalene	
5		茚	Indene	
6		萘	Naphthalene	
7		薹	Azulene	
8		并庚(炔)环 (并环庚三烯)	Heptalene	
9		联二苯叉(基)	Biphenylene	

10		as-二戊(粦)环并苯	as-Indacene	
11		s-二戊(粦)环并苯	s-Indacene	
12		茈	Acenaphthylene	
13		芴	Fluorene	
14		莈(ju)	Phenalene	
15		菲	Phenanthrene (例外编号系统)	
16		蒽	Anthracene (例外编号系统)	
17		苯芴	Fluoranthene	
18		茈菲	Acephenanthrylene	

19		茛蔥	Aceanthrylene	
20		联三苯叉(基)	Triphenylene	
21		芘	Pyrene	
22		(卅屈) 芑(qu)	Chrysene	
23		并四苯	Naphthacene	
24		昴(mao)苯 (昴星团内有七棵 亮星)	Pleiadene	
25		苈	Picene	
26		花	Perylene	

27		五芬	Pentaphene	
28		并五苯	Pentacene	
29		联四苯叉(基)	Tetraphenylene	
30		六芬	Hexaphene	
31		并六苯	Hexacene	
32		茚(hong)	Rubicene	
33		冠(guan)	Coronene	

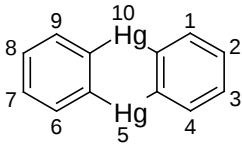
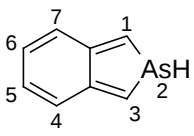
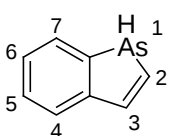
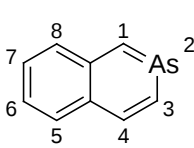
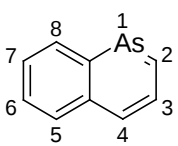
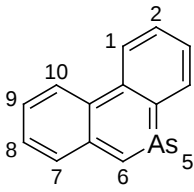
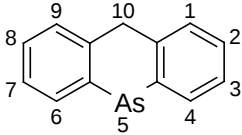
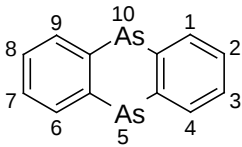
34		联三萘叉(基)	Trinaphthylene	
35		七芬	Heptaphene	
36		并七苯	Heptacene	
37		锥苯	Pyranthrene	
38		卵苯	Ovalene	

注 [1] 仅 [5] 轮烯可用作主体环名，如丁 (熯) 环 [1,2:3,4] 并二 [5] 轮烯 (cyclobuta[1,2:3,4]di[5]annulene)。作拼合体时用环烃前缀名(cycloalka)来表示此熯环环系名 (mancude-ring systems)。

注[2] [p]轮烯仅用作主体环名，作拼合体时用环烃前缀名(cycloalka)来表示此熯环环系名 (mancude-ring systems)。

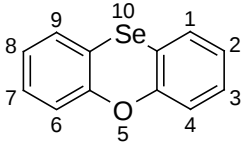
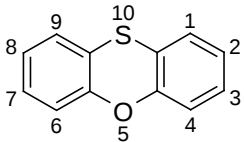
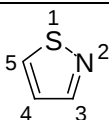
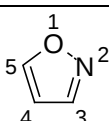
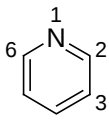
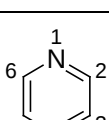
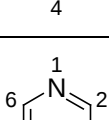
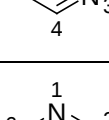
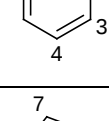
附表二 并环法命名用基本杂环

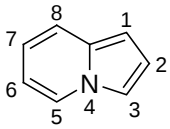
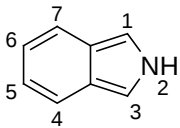
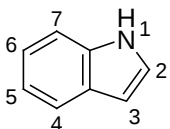
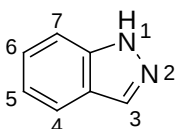
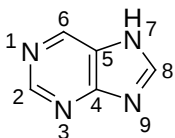
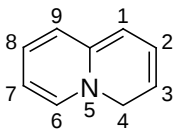
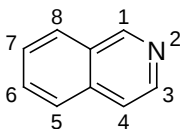
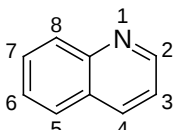
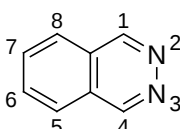
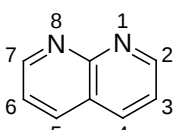
并环命名时基本杂环的扩展表，按高位优先次序排列，排列在后者为主体，在前者为拼合体，也即在并环的名称中拼合体的名称在前，主体名称在后，中间加连缀字‘并’。

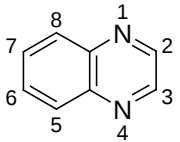
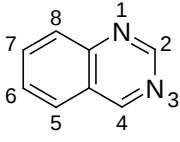
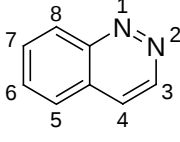
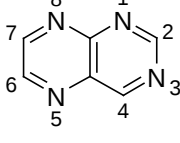
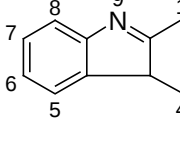
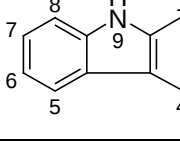
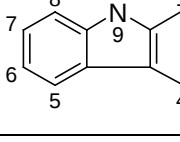
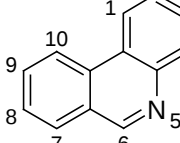
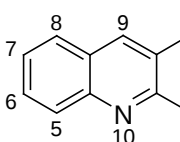
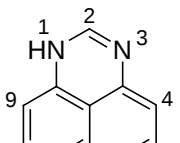
编号	结构式	中文名	英文名	注
1		二汞杂蒽	Mercuranthrene Phenomercurine	
2		异砷杂茛	Isoarsindole	
3		砷杂茛	Arsindole	
4		异砷杂蔡	Isoarsinoline	
5		砷杂蔡	Arsindoline	
6		砷杂菲	Arsanthridine	
7		砷杂蒽	Acridarsine	
8		二砷杂蒽	Arsanthrene	

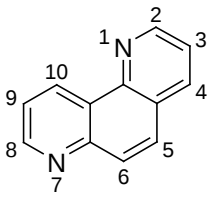
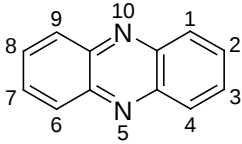
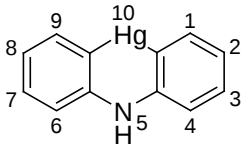
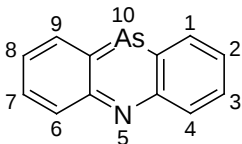
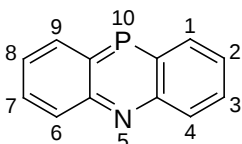
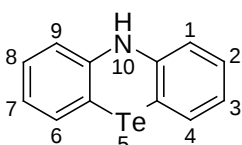
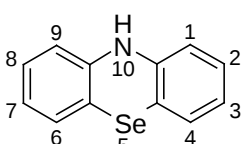
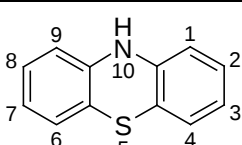
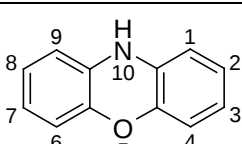
9		异磷杂茛	Isophosphindole	
10		磷杂茛	Phosphindole	
11		异磷杂萘	Isophosphinnoline	
12		磷杂萘	Phosphinnoline	
13		二磷杂蒽	Phosphanthrene	
14		碲吩	Tellurophene	
15		硒吩	Selenophene	
16		二硒杂蒽	Selenanthrene	
17		噻吩	Thiophene	
18		二硫杂蒽	Thianthrene	
19		硫砷杂蒽	Phenotharsine	

20		呋喃	Furan	
21		吡喃	Pyran	
22		苯并[c]呋喃	Isobenzofuran	
23		异色烯	Isochromene	
24		色烯	Chromene	
25		咕吨	Xanthene	
26		氧锑杂蒽	Phenoxantimonine Phenoxastibinine	
27		氧砷杂蒽	Phenoxarsine	
28		氧磷杂蒽	Phenoxaphosphine	
29		氧碲杂蒽	Phenoxatellurine	

30		氧硒杂蒽	Phenoxaslenine	
31		氧硫杂蒽（吩噻噻）	Phenoxathiine	
32		吡咯	Pyrrole	
33		咪唑	Imidazole	
34		吡唑	Pyrazole	
35		异噻唑	Isothiazole	
36		异噁唑	Isoxazole	
37		吡啶	Pyridine	
38		吡嗪	Pyrazine	
39		嘧啶	Pyrimidine	
40		哒嗪	Pyridazine	
41		1H-吡咯嗪	Pyrrolizine	

42		吲哚嗪	Indolizine	
43		异吲哚	Isoindole	
44		吲哚	Indole	
45		1 <i>H</i> -苯并吡唑 (吲唑)	Indazole	
46		嘌呤 (例外编号系统)	Purine	
47		4 <i>H</i> -喹嗪	Quinolizine	
48		异喹啉	Isoquinoline	
49		喹啉	Quinoline	
50		苯并[<i>d</i>]哒嗪 (酞嗪)	Phthalazine	
51		1,8-二氮杂萘 (吡啶并[2,3- <i>b</i>] 吡啶) (萘啶)	Naphthyridine	

52		苯并 [b] 吡嗪 (喹喔啉)	Quinoxaline	
53		苯并嘧啶 (喹唑啉)	Quinazoline	
54		苯并 [c] 哒嗪 (曾啉)	Cinnoline	
55		蝶啶	Pteridine	
56		4aH-咔唑	4aH-Carbazole	
57		咔唑	Carbazole	
58		吡啶并[3, 4- <i>b</i>] 吲哚 (β-咔啉)	β-Carboline	
59		苯并 [c] 喹啉 (菲啶)	Phenanthridine	
60		二苯并 [b,e] 吡啶 (吡啶)	Acridine	
61		蔡并[1, 8- <i>de</i>]嘧 啶 (白啶)	Perimidine	

62		二氮杂菲 (菲咯啉)	Phenathroline	
63		二苯并[b,e]吡嗪 (吩嗪)	Phenazine	
64		氮汞杂蒽 二苯并汞嗪(吩 汞嗪)	Phenomercazine	
65		氮砷杂蒽 (二苯并砷嗪) (吩砷嗪)	Phenarsazine	
66		氮磷杂蒽 二苯并磷嗪(吩 磷嗪)	Phenophosphazine	
67		碲氮杂蒽 二苯并碲嗪(吩 碲嗪)	Phenotellurazine	
68		硒氮杂蒽 (二苯并硒嗪) (吩硒嗪)	Phenoselenazine	
69		硫氮杂蒽 (二苯并[b,e]噻 嗪) (吩噻嗪)	Phenothiazine	
70		氧氮杂蒽 (二苯并[b,e]噁 嗪) (吩噁嗪)	Phenoxazine	

3.6. 桥环母体氢化物

桥环母体氢化物的命名采用扩展和修订后的 von Baeyer 命名方法, 最早 von Baeyer 提出的命名方法仅针对双环桥环化合物, 后再由 IUPAC 逐步将这一方法扩展和修订至命名三环和三环以上的桥环化合物。

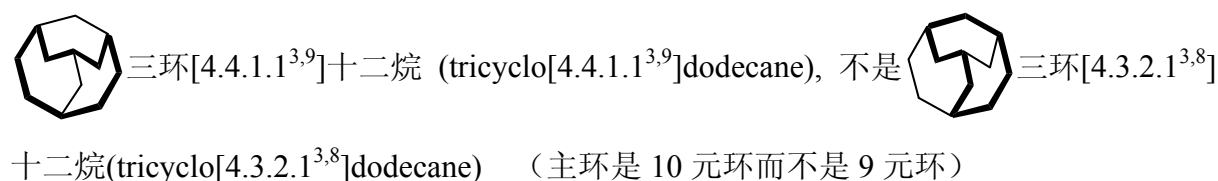
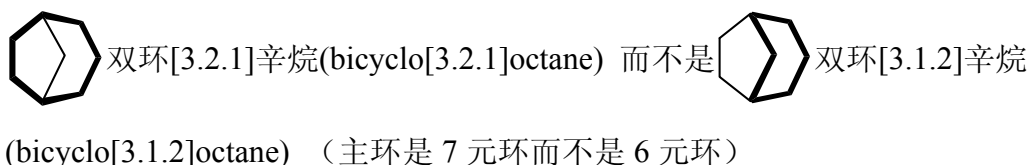
3.6.1. 定义和术语

桥头 桥头是环系统中任何连接有 3 个或更多骨架原子(不包括氢)的骨架原子。

主桥头 桥头中有两个桥头作为主桥头, 它们必须至少连有 3 个桥(桥上可能包括二级桥所需的桥头原子), 并且桥之间不共用原子。

桥 桥是一个无支链的原子链, 或者连接两个桥头的原子或价键。

主环 桥环系统中的主环指包括尽可能多的多环化合物的骨架原子的环, 并且包括两个主桥头。例: 下图中用粗线表示的环。



主桥 (main bridge) 如果分子中不止一个桥, 主桥是指其中包含有尽可能多非主环原子的桥, 主桥是连接两个主桥头的桥。

例:



三环[3.2.1.0^{2,4}]辛烷 (tricyclo[3.2.1.0^{2,4}]octane), 而不是三环[4.1.0.1^{2,5}]辛烷
(tricyclo[4.1.0.1^{2,5}]octane) (单原子主桥比无原子桥长)。

二级桥 (secondary bridge) 不包括在主环和主桥内的其它任何桥。

独立二级桥 (independent secondary bridge) 连接构成主环或主桥原子的桥(作为桥头原子)。

寄靠二级桥 (dependent secondary bridge) 至少要连接一个组成二级桥原子的桥

(作为桥头原子)。

环数 多环系统包括多个环,其环个数为把化合物变成开链化合物的最少分割次数。环的个数用适当的前缀来表示时,如双环(二环)(bicyclo (不是 dicyclo)),叁环(三环)(tricyclo),肆环(四环)(tetracyclo) 等等。

3.6.2. 双环桥环母体碳氢化物

3.6.2.1. 命名

双环体系(只包括主环和主桥)的名称构成:

前缀用双环(表明环的个数);后接桥长(即除桥头原子外的骨架原子数),放在方括号内,用小圆点隔开,3个数字从大到小排列(如[3.2.1]);再加以能表明所有骨架原子总数的碳氢化合物名称。

例:

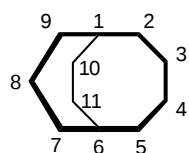


双环[3.2.1]辛烷 (bicyclo[3.2.1]octane)

3.6.2.2. 位次编号

双环体系的编号从第一个桥头原子开始经过最长的路径到达第二个桥头原子,并沿主环编号,主桥原子从编号小的桥头开始编号。

例:



双环[4.3.2]十一烷 (bicyclo[4.3.2]undecane)

3.6.3. 多环桥环母体碳氢化物

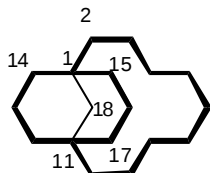
双环以上的桥环体系可以以列出组成每个二级桥的原子数的方法来命名。每个二级桥的二个架桥点的位次用一对上标表示(以逗号隔开),小的数字在前。这些表示独立二级桥的数字按从大到小的数字排列。由此多环桥环母体碳氢化物的名称由以下部分组成:

表示环个数的前缀(三环、四环等等);后接表示桥长的数字,中间以小圆点隔开并放在方括号内(在有二级桥的情况下要用上标标出二级桥的位置),如[4.2.0.0^{2,4}];再加以表明环原子总数的母体烃的名称。

例：



三环[2.2.1.0^{2,6}]庚烷 (tricyclo[2.2.1.0^{2,6}]heptane)

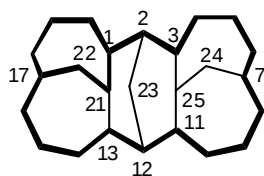


三环[9.3.3.1^{1,11}]十八烷 (tricyclo[9.3.3.1^{1,11}]octadecane), 而不是三环[9.3.3.1]十八烷
(tricyclo[9.3.3.1]octadecane)

注意：上例中独立的二级桥 C-18 需要用上标位次 1,11 表示它的架桥位点。

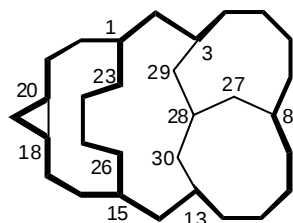
独立二级桥放在寄靠二级桥前面，表示寄靠二级桥的数字也按桥长递减顺序排列。

例：



六环[15.3.2.2^{3,7}.1^{2,12}.0^{13,21}.0^{11,25}]二十五烷

(hexacyclo[15.3.2.2^{3,7}.1^{2,12}.0^{13,21}.0^{11,25}]pentacosane) (0^{11,25} 是一个寄靠二级桥)



五环[13.7.4.3^{3,8}.0^{18,20}.1^{13,28}]三十烷 (pentacyclo[13.7.4.3^{3,8}.0^{18,20}.1^{13,28}]triacontane) (1^{13,28} 是一个寄靠二级桥)

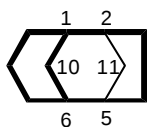
注意：组成主环、主桥和所有二级桥的原子数之和加上 2 等于骨架总原子数。如在上面的例子中(13+7+4+3+1)+2=30，是三十烷。

3.6.3.1. 多环桥环母体碳氢化物命名的进一步规则

如有多种可能方式命名该多环桥环时，可按下列标准依次逐条对照，直至作出选择为止。

(1) 主环应该被主桥尽可能均匀地分割。

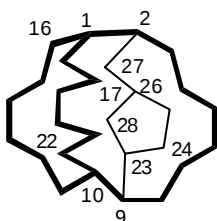
例：



三环[4.3.1.1^{2,5}]十一烷 (tricyclo[4.3.1.1^{2,5}]tridecane), 而不是三环[5.2.1.1^{2,6}]十一烷 (tricyclo[5.2.1.1^{2,6}]tridecane) (4.3 比 5.2 更均匀)

(2) 第一个独立二级桥要尽可能的长, 第二个独立二级桥也同时要尽可能的长, 如此等等。并依次按桥长列出。

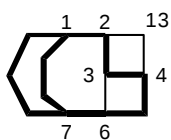
例：



四环[8.6.6.5^{2,9}.1^{23,26}]二十八烷 (tetracyclo[8.6.6.5^{2,9}.1^{23,26}]octacosane), 而不是四环[8.6.6.4^{2,9}.2^{23,25}]二十八烷 (tetracyclo[8.6.6.4^{2,9}.2^{23,25}]octacosane) (8.6.6.5.1, 8.6.6.4.2, 5 比 4 长)

(3) 寄靠二级桥数要尽可能的少。

例：



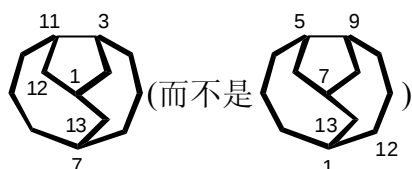
(四环[5.3.2.1^{2,4}.0^{3,6}]十三烷) (tetracyclo[5.3.2.1^{2,4}.0^{3,6}]tridecan),

不是 (四环[5.3.2.1^{2,4}.0^{6,13}]十三烷) (tetracyclo[5.3.2.1^{2,4}.0^{6,13}]tridecan), 0^{6,13} 是

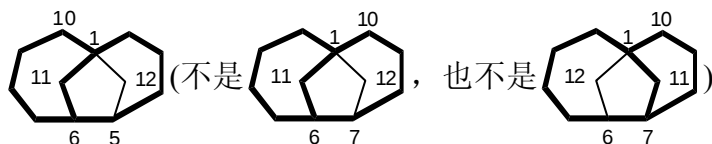
一个寄靠二级桥), 也不是 (四环[5.3.2.1^{4,6}.0^{2,5}]十三烷 (tetracyclo[5.3.2.1^{4,6}.0^{2,5}]tridecan), 见下节)

(4) 编号时把所有二级桥的上标数字按升序排列, 依次比较, 选择数字串中开始呈现较小的命名方式。

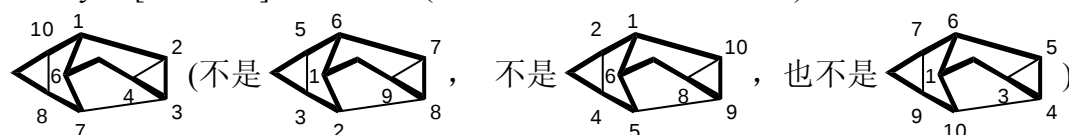
例：



三环[5.5.1.0^{3,11}]十三烷 (tricyclo[5.5.1.0^{3,11}]tridecane), 不是三环[5.5.1.0^{5,9}]十三烷 (tricyclo[5.5.1.0^{5,9}]tridecane) (3,11 比 5,9 小)



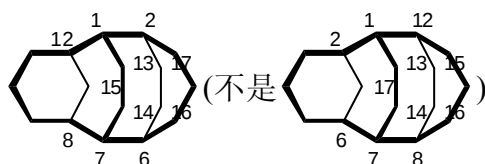
三环[4.4.1.1^{1,5}]十二烷 (tricyclo[4.4.1.1^{1,5}]dodecane), 不是三环[4.4.1.1^{1,7}]十二烷 (tricyclo[4.4.1.1^{1,7}]dodecane) (1,5 低于 1,7), 也不是三环[5.3.1.1^{1,6}]十二烷 (tricyclo[5.3.1.1^{1,6}]dodecane) (4.4 分割比 5.3 分割更均匀)



五环[4.4.0.0^{2,4}.0^{3,7}.0^{8,10}]癸烷 (pentacyclo[4.4.0.0^{2,4}.0^{3,7}.0^{8,10}]decane), 不是五环[4.4.0.0^{2,8}.0^{3,5}.0^{7,9}]癸烷 (pentacyclo[4.4.0.0^{2,8}.0^{3,5}.0^{7,9}]decane) (2,3,4,7,8,10 低于 2,3,5,7,8,9), 也不是五环[4.4.0.0^{2,4}.0^{5,9}.0^{8,10}]癸烷 (pentacyclo[4.4.0.0^{2,4}.0^{5,9}.0^{8,10}]decane) (2,3,4,7,8,10 低于 2,4,5,8,9,10), 也不是五环[4.4.0.0^{3,5}.0^{4,10}.0^{7,9}]癸烷 (pentacyclo[4.4.0.0^{3,5}.0^{4,10}.0^{7,9}]decane) (2,3,4,7,8,10 低于 3,4,5,7,9,10)

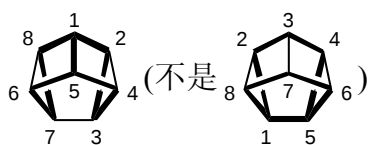
(5) 数字相同时, 排列在前的二级桥的上标数字要小。

例:



四环[5.5.2.2^{2,6}.1^{8,12}]十七烷 (tetracyclo[5.5.2.2^{2,6}.1^{8,12}]tetracyclo), 不是四环[5.5.2.2^{8,12}.1^{2,6}]十七烷 (tetracyclo[5.5.2.2^{8,12}.1^{2,6}]tetracyclo) (2,6,8,12 低于 8,12,2,6)

例:

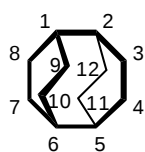


五环[3.3.0.0^{2,4}.0^{3,7}.0^{6,8}]辛烷 (pentacyclo[3.3.0.0^{2,4}.0^{3,7}.0^{6,8}]octane), 不是五环[3.3.0.0^{2,8}.0^{3,7}.0^{4,6}]辛烷 (pentacyclo[3.3.0.0^{2,8}.0^{3,7}.0^{4,6}]octane) (2,4,3,7,6,8 低于 2,8,3,7,4,6)

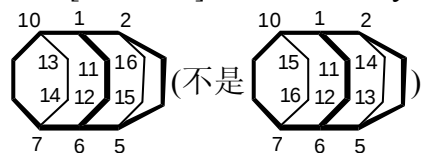
3.6.3.2. 多环桥环母体碳氢化物命名中二级桥的编号

主环和主桥的编号完成后(见 3.6.2.2.), 再依次进行独立二级桥和寄靠二级桥的编号。编号紧接着主环和主桥的最高位次数字, 从连接最高数位桥头原子的二级桥开始编号, 然后再编桥头为次高数位的二级桥, 并以此类推。二级桥中桥原子的编号顺序都从高数位的桥头原子开始。

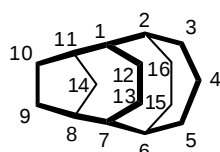
例：



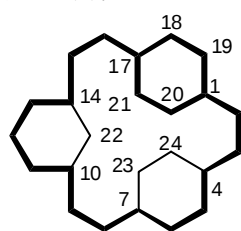
三环[4.2.2.^{2,5}]十二烷 (tricyclo[4.2.2.^{2,5}]dodecane) (二级桥从桥头 5 开始编号)



四环[4.4.2.2.^{2,5}.2^{7,10}]十六烷 (tetracyclo[4.4.2.2.^{2,5}.2^{7,10}]hexadecane) (第一个二级桥从桥头 10 开始编号，第二个二级桥从桥头 5 开始编号)



四环[5.4.2.2.^{2,6}.1^{8,11}]十六烷 (tetracyclo[5.4.2.2.^{2,6}.1^{8,11}]hexadecane) (第一个编号的二级桥是和桥头 11 相连)



四环[15.2.2.2.^{4,7}.1^{10,14}]二十四烷(tetracyclo[15.2.2.2.^{4,7}.1^{10,14}]tetracosane) (第一个编号的二级桥是和桥头 14 相连)

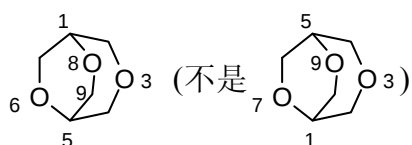
3.6.4. 被修饰桥环环系（杂环、不饱和环、有立体构型的环等）的命名

杂原子用置换操作法来表示(见 2.2.2.1 节)；不饱和的情况下则以烯、二烯等结尾来表示；立体化学用 *R/S* 标注；取代基和主体官能团以常规方法表示。被修饰桥环环系环原子的编号，如有疑义可按下列标准依次逐条对照，直至作出选择为止。

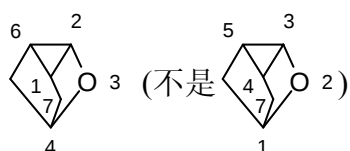
3.6.4.1. 杂原子置换后的编号

(1) 置换操作法命名中杂原子位次以升序的方式排列成数字组时，取低位次组的编号方式。

例：



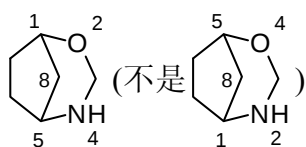
3,6,8-三氧杂二环[3.2.2]壬烷 (3,6,8-trioxabicyclo[3.2.2]nonane), 不是 3,7,9-三氧杂二环[3.2.2]壬烷 (3,7,9-trioxabicyclo[3.2.2]nonane) (3,6,8 低于 3,7,9)



然而上述化合物是 3-氧杂三环[2.2.1.0^{2,6}]庚烷 (3-oxatricyclo[2.2.1.0^{2,6}]heptane)，而不是 2-氧杂三环[2.2.1.0^{3,5}]庚烷 (2-oxatricyclo[2.2.1.0^{3,5}]heptane) (编号时优先考虑桥的编号再考虑杂原子，2,6 低于 3,5)。

(2) 低的位置标识参考 Hantzsch-Widman 杂环命名系统的杂原子排列表 (见 3.3.3.1. 表 3-3) 中的顺序分配给高位的杂原子。

例：

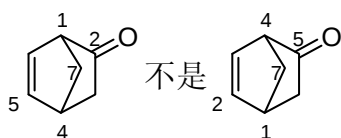


2-氧杂-4-氮杂二环[3.2.1]癸烷 (2-oxa-4-azabicyclo[3.2.1]octane)，不是 4-氧杂-2-氮杂癸烷 (4-oxa-2-azabicyclo[3.2.1]octane) (2-氧低于 4-氧，氧较氮的位高)。

3.6.4.2. 带主体官能团后的编号

主体官能团的位置标识要低

例

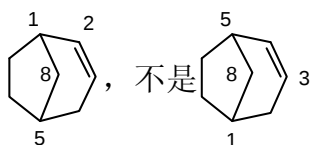


二环[2.2.1]庚-5-烯-2-酮 (bicyclo[2.2.1]hept-5-en-2-one)，不是二环[2.2.1]庚-2-烯-5-酮 (bicyclo[2.2.1]hept-2-en-5-one) (2-酮比 5-酮低)

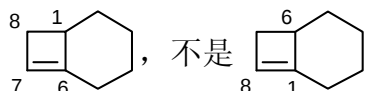
3.6.4.3. 带重键时的编号

具有连续编号的双键原子的位次低，当双键的两个原子位次差一的话，只标出位次低的原子，如果双键上的两个原子编号是不连续的，则要用复合编号，但尽量少用复合位置标识，只有当双键两端原子无法区别时才用复合编号，当必须用复合位置标识时，高的位次置于括号内。苯环可以相应于 Kekule 结构的环己三烯来进行命名。其他芳环也按此方法处理。如果同时存在双键和叁键，编号时先考虑所有多重键的位次数字组低，然后才是双键的位次。

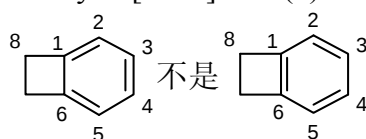
例：



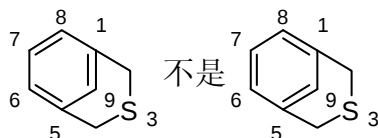
二环[3.2.1]辛-2-烯 (bicyclo[3.2.1]oct-2-ene), 不是二环[3.2.1]辛-3-烯 (bicyclo[3.2.1]oct-3-ene) (2-烯低于 3-烯)



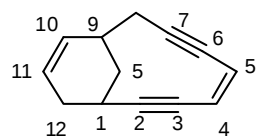
二环[4.2.0]辛-6-烯(bicyclo[4.2.0]oct-6-ene), 不是二环[4.2.0]辛-1(8)-烯 (bicyclo[4.2.0]oct-1(8)-ene) (尽量不用复合位置标识)



二环[4.2.0]辛-1,3,5-三烯 (bicyclo[4.2.0]octa-1,3,5-trien), 不是二环[4.2.0]辛-1(6),2,4-三烯 (bicyclo[4.2.0]octa-1(6),2,4-trien)



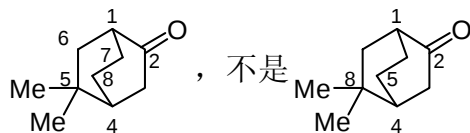
3-硫杂二环[3.3.1]壬-1(9),5,7-三烯 (3-thiabicyclo[3.3.1]nona-1(9),5,7-trien), 不是 3-硫杂二环[3.3.1]壬-1(8),5(9),7-三烯 (3-thiabicyclo[3.3.1]nona-1(8),5(9),7-trien) (用一个复合位置标识, 不用两个)。



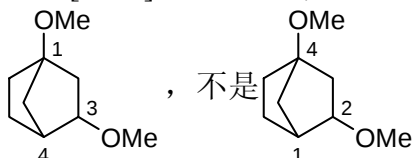
二环[7.3.1]十三-4,10-二烯-2,6-二炔 (bicyclo[7.3.1]trideca-4,10-diene-2,6-diyne), 不是二环[7.3.1]十三-5,11-二烯-3,7-二炔 (bicyclo[7.3.1]trideca-5,11-diene-3,7-diyne) (2,4,6,10 低于 3,5,7,11)。

3.6.4.4. 带取代基时的编号

取代基的位置编号要低, 并且用前缀表示出取代基的位置。



5,5-二甲基二环[2.2.2]辛-2-酮 (5,5-dimethylbicyclo[2.2.2]octan-2-one), 不是 8,8-二甲基二环[2.2.2]辛-2-酮 (8,8-dimethylbicyclo[2.2.2]octan-2-one) (5,5 低于 8,8)

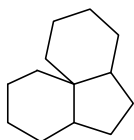


1,3-二甲氧基二环[2.2.1]庚烷 (1,3-dimethoxybicyclo[2.2.1]heptane), 不是 2,4-二甲氧基二环[2.2.1]庚烷 (2,4-dimethoxybicyclo[2.2.1]heptane)

3.7. 螺环母体氢化物

螺环母体氢化物为两个（或三个）环组成的环系，这些环之间没有桥相连接，且仅有一个公共原子，这些环可以是其它环系（并环、桥并环或桥环）的一部分，此公共原子称作螺原子。按存在螺原子的数目，化合物可区分为含单螺、二螺、三螺等不同环系。

螺环组成环系间有桥相连者（如下例）曾称非‘自由螺合（free spiro union）’体系，现不归入螺环母体氢化物。



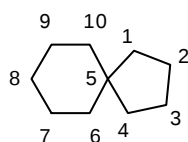
3.7.1. 单环组成的螺环母体氢化物

3.7.1.1. 两个单环组成的单螺母体氢化物

由两个饱和单环组成的单螺环烃的命名，是以“螺”字为前缀，后用方括号标明每个环的环原子数目，按数字递增排列，数字之间用小圆点“.”分开，方括号后再以表示整个螺环骨架原子总数的烃的名称为后缀，如螺[3.4]辛烷（spiro[4.4]octane）。

此单螺母体氢化物的编号从较小环中与螺原子相邻的碳原子开始，沿较小环顺序编号至螺原子，再绕第二个环继续编号。

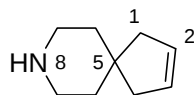
例：



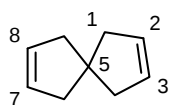
螺[4.5]癸烷（spiro[4.5]decane），不是螺[5.4]癸烷

若螺烃中含有杂原子，则将前缀“螺”替换为相应的“某杂螺”。对于不饱和螺烃则采用通常的做法，词尾采用烯、二烯等。

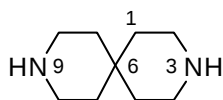
例：



8-氮杂螺[4.5]癸-2-烯（8-azaspiro[4.5]dec-2-ene）



螺[4.4]壬-2,7-二烯（spiro[4.4]nona-2,7-diene）

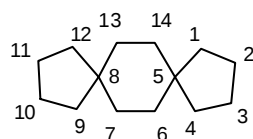


3,9-二氮杂螺[4.5]十一烷 (3,9-diazaspiro[4.5]undecane)

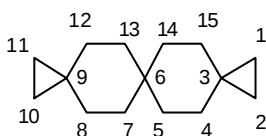
3.7.1.2. 单环组成的未分叉多螺母体氢化物

仅有单环组成的未分叉多螺母体氢化物，通过前缀‘双螺’、‘三螺’等表明螺原子个数，并以环原子的总数命名此母体。在前缀与母体名称之间加方括号标记，用以说明螺原子间相连的碳原子的数目。此时螺环骨架原子的编号和计数从一个较小的端基环（如二个端基环大小不同）与螺原子相邻的原子开始，依次顺序通过每一螺原子和螺原子间较短的连接原子链编号至另一端基环，再经过其它连接原子链回到第一个螺原子。螺原子间相连的碳原子的数目依次用小圆点‘.’分隔并放在方括号内。对于含三个及其以上螺原子数的螺环体系，每次当一个螺原子被再次涉及时，则将该螺原子的编号以上标方式标注在与其再次相连时的链原子数目上。

例：



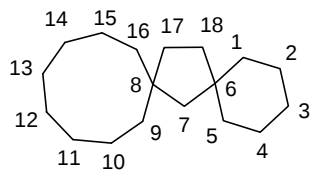
双螺[4.2.4⁸.2⁵]十四烷 (dispiro[4.2.4⁸.2⁵]tetradecane)



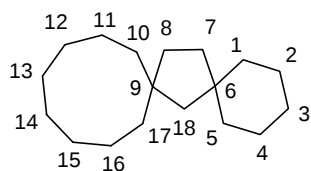
三螺[2.2.2.2⁹.2⁶.2³]十五烷 (trispiro[2.2.2.2⁹.2⁶.2³]pentadecane)

编号时应采取螺原子编号数较小的方式，也即上面提出的首先沿螺原子间较短的原子链进行编号。

例：



双螺[5,1,8⁸,2⁶]十八烷 (dispiro[5,1,8⁸,2⁶]octadecane)，而不是

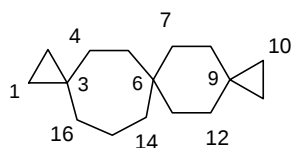


双螺[5,2,8⁹,1⁶]十八烷 (dispiro[5,2,8⁹,1⁶]octadecane)

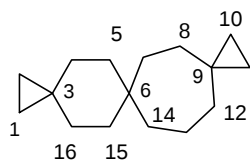
螺原子编号‘6,8’小于‘6,9’；螺原子间链原子数组‘5,1,8,2’小于‘5,2,8,1’。

若还存在不同编号方式,则可由其方括号标记中数字顺序上加以考虑。采用数字顺序中出现首次不同数字时的数低者。

例:



三螺[2.2,2⁹,2⁶,3³]十六烷 (trispiro[2.2,2⁹,2⁶,3³]hexadecane), 而不是



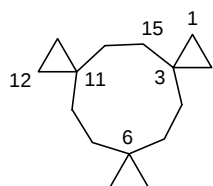
三螺[2.2,2⁹,3⁶,2³]十六烷 (trispiro[2.2,2⁹,3⁶,2³]hexadecane)。

‘2.2,2⁹,2⁶,3³’低于‘2.2,2⁹,3⁶,2³’。

3.7.1.3. 单环组成的分叉多螺母体氢化物

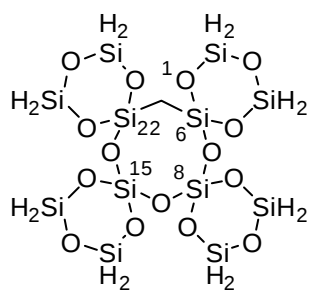
仅有单环所组成的分叉多螺体系,命名时用前缀‘三螺’、‘四螺’等给出螺原子数目,再根据螺环体系中总的环原子数目给出母体名称。在前缀与烃名称之间加方括号标记,表明螺原子间所夹碳原子的数目,数目之间用‘.’分隔。数字编号从一个端基环开始,编号至另一端基环,依次直至第一个螺原子。这些数字编号之间用‘.’分隔并放在方括号内。该化合物依据其上述编号顺序进行编号。对于含三个及其以上数目螺原子的螺体系,每次当一个螺原子被再次涉及时,则将该螺原子的编号以上标方式标注在与其再次相连时的链原子数目上。

例:



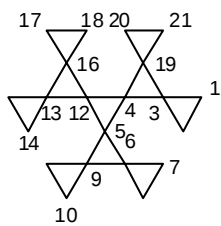
三螺[2.2,2⁶,2.2¹¹,2³]十五烷 (trispiro[2.2,2⁶,2.2¹¹,2³]pentadecane)

注:若去掉上标,上述化合物的命名就与上节中第二个化合物去掉上标后的名称相同。



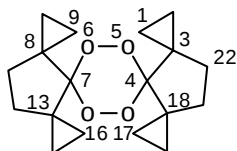
四螺[5.1.5⁸.1.5¹⁵.1.5²².1⁶]十二硅氧烷

(tetraspiro[5.1.5⁸.1.5¹⁵.1.5²².1⁶]dodecasiloxane)。



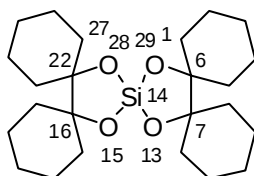
九螺[2.0.0.0.2⁶.0.2⁹.0⁵.0.0.2¹³.0.2¹⁶.0¹².0⁴.0.2¹⁹.0³]二十一烷

(nonaspiro[2.0.0.0.2⁶.0.2⁹.0⁵.0.0.2¹³.0.2¹⁶.0¹².0⁴.0.2¹⁹.0³]henicosane)。



5,6,16,17-四氧杂六螺[2.0.2.0.2⁸.2.2¹³.0⁷.2⁴.0.2¹⁸.2³]二十二烷

(5,6,16,17-tetraoxahexaspiro[2.0.2.0.2⁸.2.2¹³.0⁷.2⁴.0.2¹⁸.2³]docosane)。

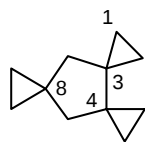


13,15,28,29-四氧杂-14-硅杂五螺[5.0.5⁷.1.1.5¹⁶.0.5²².1¹⁴.1⁶]二十九烷

(13,15,28,29-tetraoxa-14-silapentaspiro[5.0.5⁷.1.1.5¹⁶.0.5²².1¹⁴.1⁶]nonacosane)。

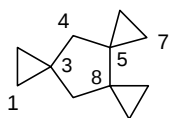
若存在不同的编号方式，则选择螺原子编号最小的方式进行命名。

例：



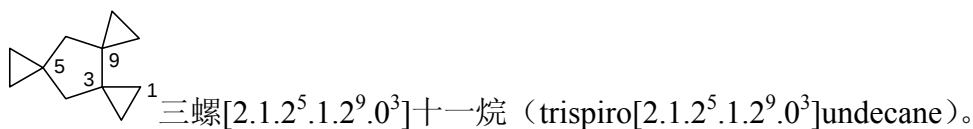
三螺[2.0.2⁴.1.2⁸.1³]十一烷 (trispiro[2.0.2⁴.1.2⁸.1³]undecane)

不是



三螺[2.1.2⁵.0.2⁸.1³]十一烷 (trispiro[2.0.2⁵.1.2⁸.1³]undecane)

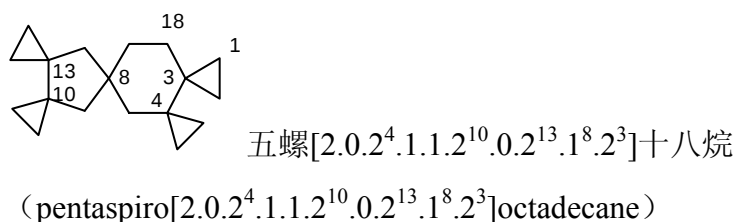
也不是



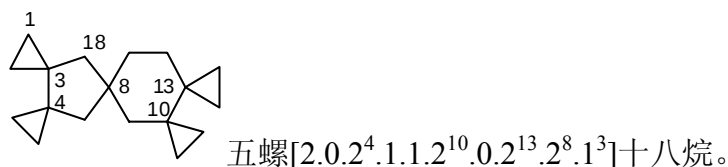
‘3,4,8’ 低于 ‘3,5,8’ 或 ‘3,5,9’。

若还存在不同编号方式,则可以依据方括号内的引用顺序进行考察。采用螺原子间所夹碳原子数目排列开始出现不同时,以数字较小的方式进行命名。

例:



而不是

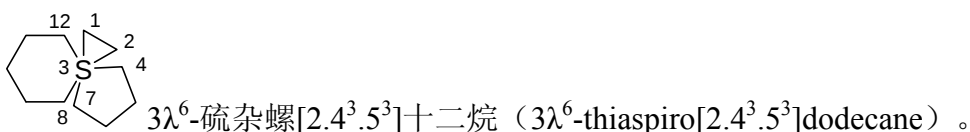
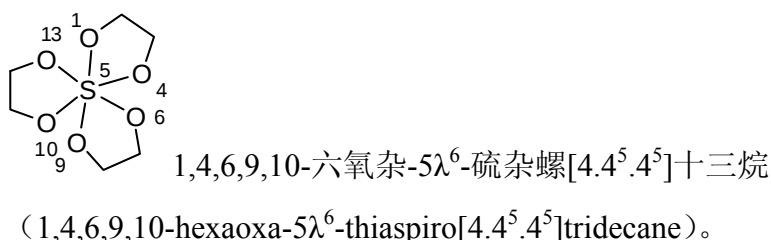


‘2.0.2⁴.1.1.2¹⁰.0.2¹³.1⁸.2³’ 低于 ‘2.0.2⁴.1.1.2¹⁰.0.2¹³.2⁸.1³’。

3.7.1.4. 三个单环和一个螺原子所组成环系 (如六价螺原子)

命名时在方括号标记前面加‘螺’前缀,在其后是与环系中总原子数目相应的的烃。存在杂原子时以置换法在前缀中标明,对于非标准价态的原子使用‘λ’进行标识。当不止一次提到某螺原子时,每次都该螺原子的编号作为上标,标注在该螺原子所相应的标记数字上。如三环大小不同时,则从较小环开始编号。

例:

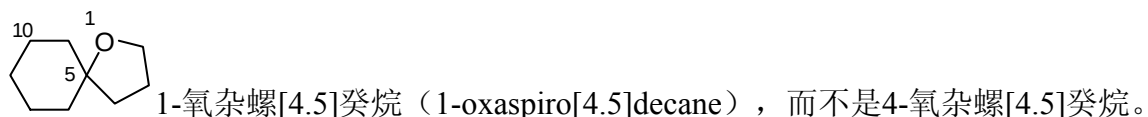


3.7.1.5. 单环组成螺环体系中存在杂原子、特性基团（官能团）、取代基时的编号规则

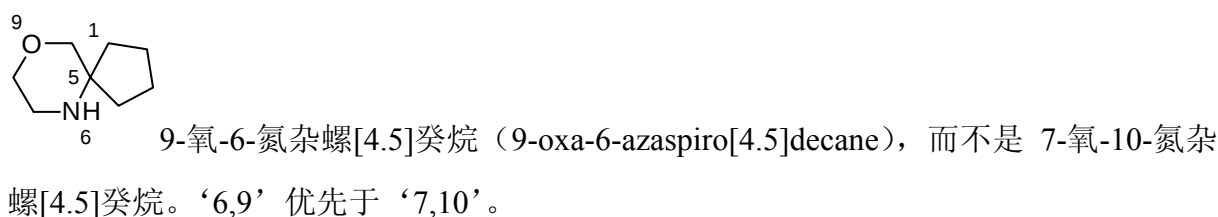
存在杂原子、特性基团（官能团）或取代基时，环系的编号可依次使用下面的优先规则进行。

（1）存在杂原子时，用置换法命名，采用杂原子的编号较小原则。

例：

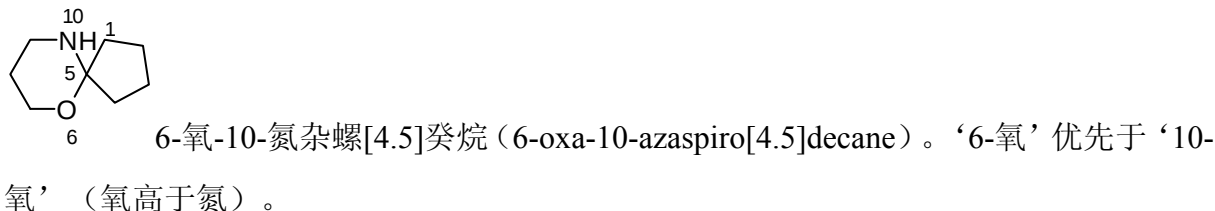


又例：



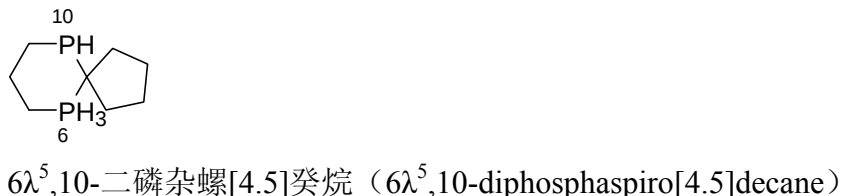
（2）当二种杂原子编号数字存在选择时，采用高位杂原子编号较小原则（参见 3.3.3.1 节）。

例：



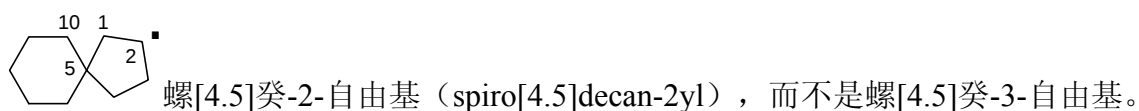
（3）引入‘λ’进行价态标识的非标准价态杂原子的编号较小原则。若存在不止一个非标准价态杂原子，其价态越高，编号越小。

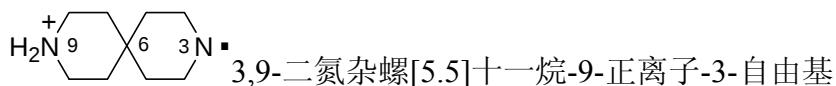
例：



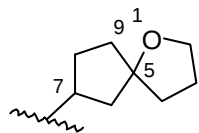
（4）自由基编号较小原则。若该环系作为取代基，则使结合点的编号较小。

例：





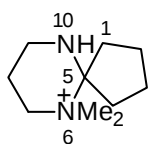
(3,9-diazaspiro[5.5]undecan-9-ium-3-yl)，而不是3,9-二氮杂螺[5.5]十一烷-3-正离子-9-自由基。



1-氧杂螺[4.4]壬-7-基 (1-oxaspiro[4.4]nonan-7-yl)，而不是 1-氧杂螺[4.4]壬-8-基。

(5) 正离子编号较小原则

例：

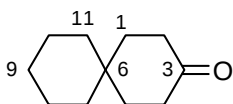


6,6-二甲基-6,10-二氮杂螺[4.5]癸-6-正离子

(6,6-dimethyl-6,10-diazaspiro[4.5]decan-6-ium)，也可以命名为6,6-二甲基-10-氮杂-6-氮正离子杂螺[4.5]癸烷。但不能命名为：10,10-二甲基-6,10-二氮杂螺[4,5]癸-10-正离子 (10,10-dimethyl-6,10-diazaspiro[4,5]decan-10-ium)。⁶正离子’优先于‘10-正离子’。

(6) 主要官能团编号较小原则

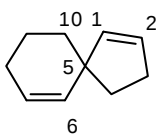
例：



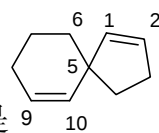
螺[5.5]壬-3-酮 (spiro[5.5]undecan-3-one)，而不是螺[5.5]壬-9-酮。³优先于‘9’。

(7) 双键编号较小原则

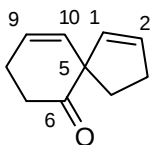
例：



螺[4.5]癸-1,6-二烯 (spiro[4.5]deca-1,6-diene)，而不是



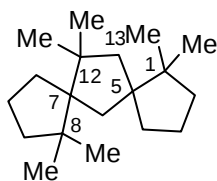
螺[4.5]癸-1,9-二烯。^{1,6}优先于‘1,9’。



螺[4.5]癸-1,9-二烯-6-酮 (spiro[4.5]deca-1,9-dien-6-one)，而不是螺[4.5]癸-1,6-二烯-10-酮。^{6-酮}优先于‘10-酮’。

(8) 作为前缀的相同取代基所连原子位次编号较小原则。

例：

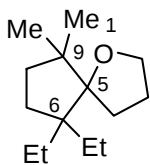


1,1,8,8,12,12-六甲基二螺[4.1.4.2]十三烷

(1,1,8,8,12,12-hexamethyldispiro[4.1.4.2]tridecane)，而不是1,1,8,8,13,13-六甲基二螺[4.1.4.2] 十三烷。

(9) 取代基不同时，引用在前的取代基所连原子位次编号较小原则。

例：

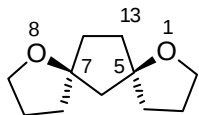


6,6-二乙基-9,9-二甲基-氧杂螺[4.4]壬烷

(6,6-diethyl-9,9-dimethyl-oxaspiro[4.4]nonane)。

(10) *R* 构型的手性中心原子编号较小原则

例：



(5*R*,7*S*)-1,8-二氧杂二螺 [4.1.4.2] 十三烷

((5*R*,7*S*)-1,8-dioxadispiro[4.1.4.2]tridecane)。而不是(5*S*,7*R*)-1,8-二氧杂二螺 [4.1.4.2] 十三烷，‘5*R*’ 优先于 ‘5*S*’。

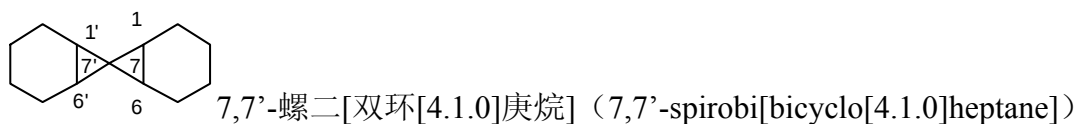
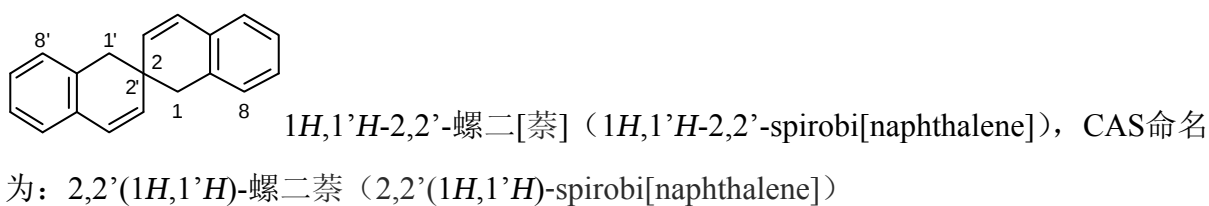
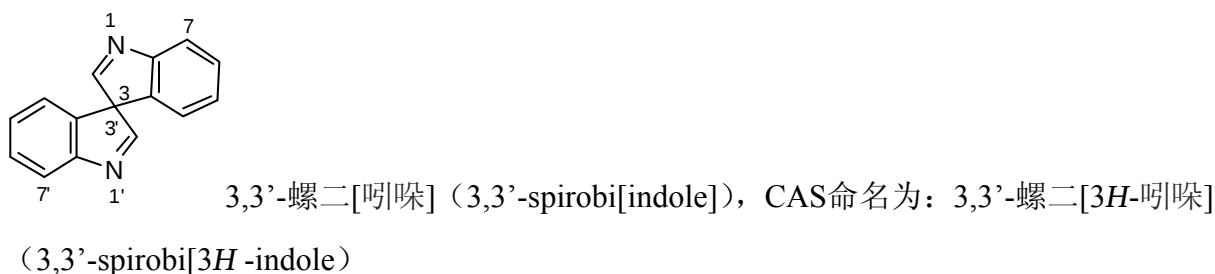
3.7.2. 含多环体系螺环母体氢化物

3.7.2.1. 含有两个相同多环组分的单螺化合物

含有两个相同多环组分（不管是否包括双键和杂原子）的单螺化合物的命名，是在置于方括号内的组分环名称的前面加上前缀‘螺二’。用于定义组分环系的位次编号置于方括号内。所建立的螺环体系仍采用多环组分体系原来的编号系统，但第二个组分环的编号加撇。螺原子的位次编号（不加撇的在前）放在名称前面。较小编号优先。整体骨架确定后，体系尽量安排为慢环（mancude）状态。若需使用额外氢给出双键的位置，则将额外氢放在螺原子编号的前面。额外氢也是较小编号优先。

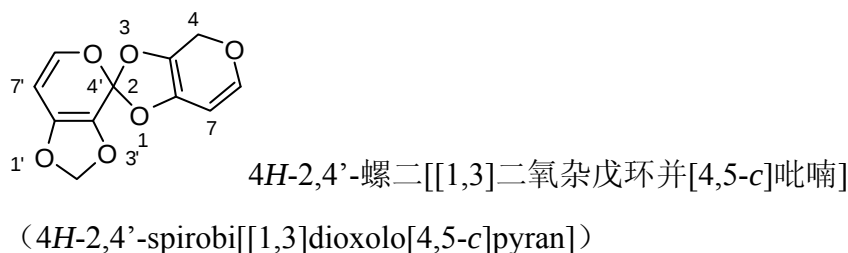
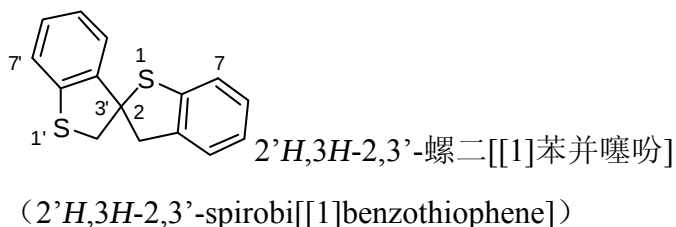
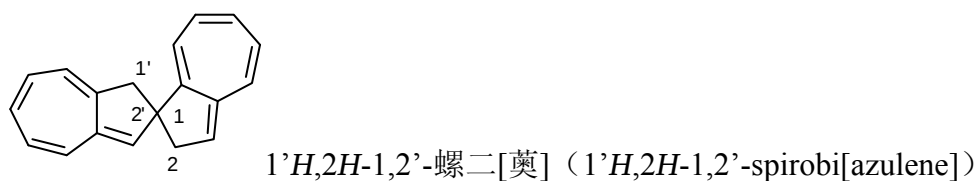
(1) 两个相同多环组分、相同螺联位点的螺环体系即可按上述规则命名。

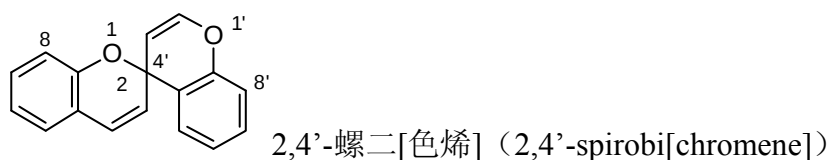
例：



(2) 螺联位点不同而需要选择何者组分环位次编号加撇时，则螺原子编号较小者不加撇。

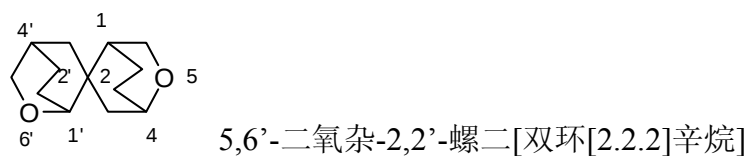
例：



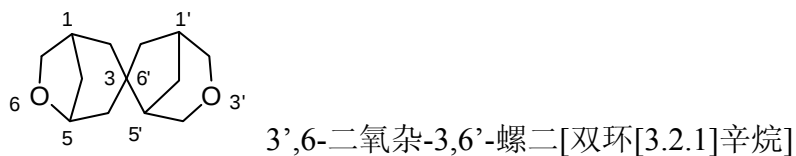


(3) 对组分为用置换法命名含杂原子的桥环螺环体系时，先对整个螺环作为饱和烃进行命名，再将置换的杂原子作为前缀放在螺环烃名称前面。编号如需作出抉择时，则先螺原子，再杂原子。

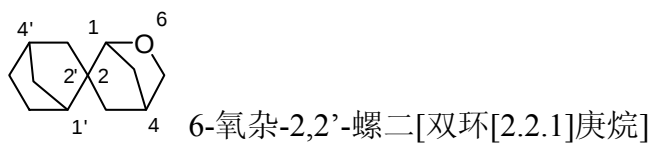
例：



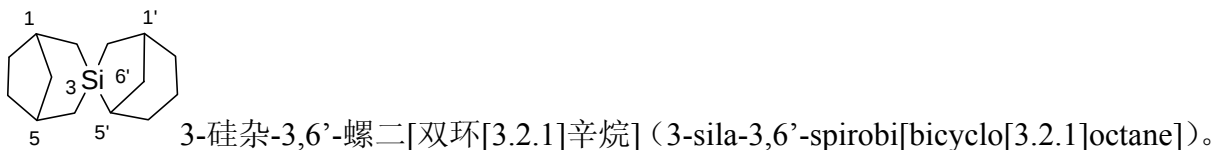
(5,6'-dioxo-2,2'-spirobi[bicyclo[2.2.2]octane])，而不是6,8'-二氧杂-2,2'-螺二[双环[2.2.2]辛烷]。‘5,6’优先于‘6,8’。



(3',6-dioxo-3,6'-spirobi[bicyclo[3.2.1]octane])

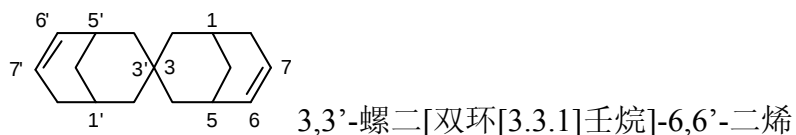


(6-oxo-2,2'-spirobi[bicyclo[2.2.1]heptane])

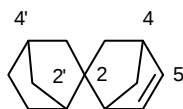


(4) 使用von Baeyer桥环命名法命名环组分中的不饱和情况时，用烯、二烯等词尾表示。编号如需作出抉择时，则使用较小数字编号的优先次序为：(i)螺原子，(ii)杂原子，(iii)主要官能团，(iv)双键。

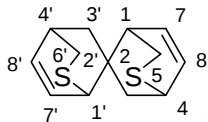
例：



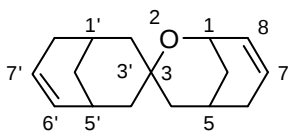
(3,3'-spirobi[bicyclo[3.3.1]nonane]-6,6'-diene)



2,2'-螺二[双环[2.2.1]庚烷]-5-烯 (2,2'-spirobi[bicyclo[2.2.1]heptan]-5-ene)



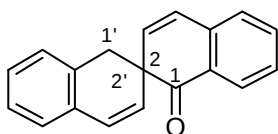
5,6'-二硫杂-2,2'-螺二[双环[2.2.2]辛烷]-7,7'-二烯
(5,6'-dithia-2,2'-spirobi[bicyclo[2.2.2]octane]-7,7'-diene)



2-氧杂-3,3'-螺二[双环[3.3.1]壬烷]-6',7-二烯
(2-oxa-3,3'-spirobi[bicyclo[3.3.1]nonane]-6',7-diene)

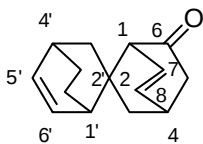
(5) 若组分环的编号上还有分歧时，则可按通常的编号规则处理；若编号的数字相同，不加撇的置于加撇的编号前面。

例：



1H,1'H-2,2'-螺二[萘]-1-酮 (1H,1'H-2,2'-spirobi[naphthalen]-1-one)。

‘1H’ 可以省略。



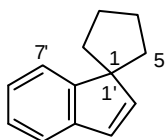
2,2'-螺二[双环[2.2.2]辛烷]-5',7-二烯-6-酮

(2,2'-spirobi[bicyclo[2.2.2]octane]-5',7-dien-6-one)

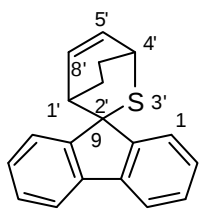
3.7.2.2. 含有不同组分环且至少一个多环的单螺化合物

含有不同组分环且至少一个为多环的单螺化合物的命名，先在方括号内按照英文名称字母顺序给出不同组分环的名称，再在方括号前面加前缀‘螺’。螺原子的位置通过置于两组分环名称中间，且用逗号分隔的位次编号进行标识，位次编号前后加短横。第二个组分的位次编号加撇，其它任何用于对该组分环进行命名的编号都不加撇，但置于方括号中。若有额外氢，则置于整个名称最前面。

例：

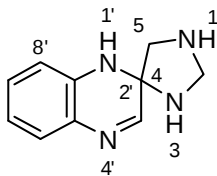


螺[环戊烷-1,1'-茚] (spiro[cyclopentane-1,1'-indene])

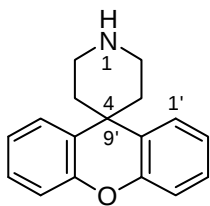


螺[芴-9,2'-[3]硫杂双环[2.2.2]辛[5]烯]

(spiro[fluorene-9,2'-[3]thiabicyclo[2.2.2]oct[5]ene])

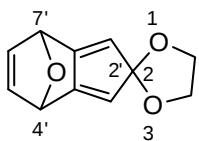


1'*H*-螺[咪唑烷-4,2'-喹喔啉] (1'*H*-spiro[imidazolidine-4,2'-quinoxaline])



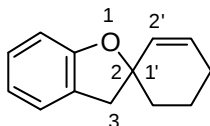
螺[哌啶-4,9'-氧杂蒽] (螺[哌啶-4,9'-咕吨])

(spiro[piperidine-4,9'-xanthene])



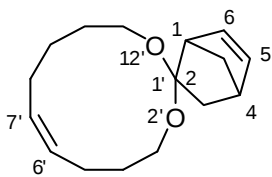
4',7'-二氢螺[1,3-二氧杂戊环烷-2,2'-[4,7]氧桥茚]

(4',7'-dihydrospiro[1,3-dioxolane-2,2'-[4,7]epoxyindene])



3*H*-螺[1-苯并呋喃-2,1'-环己[2]烯]

(3*H*-spiro[1-benzofuran-2,1'-cyclohex[2]ene])



螺[二环[2.2.1]己-5-烯-2,1'-[2,12]二氧杂环十二[6]烯]

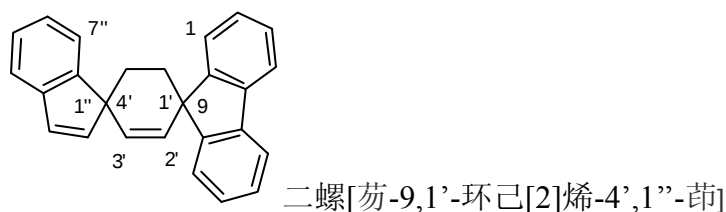
(spiro[bicyclo[2.2.1]hept-5-ene-2,1'-[2,12]dioxacyclododec[6]ene])

3.7.2.3. 含有至少两个不同组分且至少一个为多环的不分叉多螺化合物

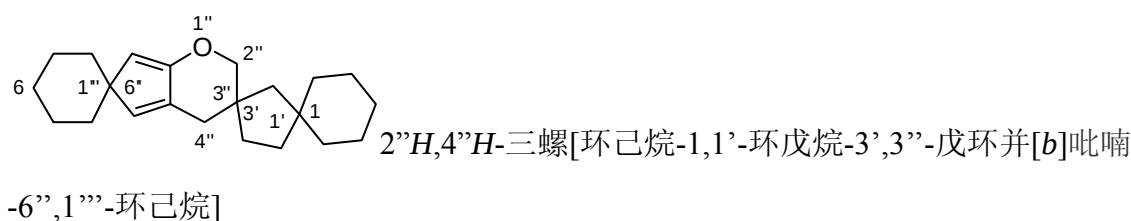
含有至少两个不同组分且至少一个为多环的不分叉多螺化合物的命名, 先从首字母在先的末端环开始, 按连接顺序依次将组分环排列在方括号内, 然后在方括号前面加上‘二螺’、‘三螺’等前缀标识螺原子个数。第一个组分的编号不加撇, 第二个加单撇,

第三个加两撇，依次类推。第二及其以后组分的名称中出现的编号都不加撇，但需置于方括号中。螺原子的位次通过置于两组分名称之间、以逗号分隔的编号组（对）进行标识，前后加短横。若存在额外氢，则将其置于整个名称的最前面。若两端组分相同，则比较与其相连的第二组组分的字母顺序，依次类推。两端基组分相同的二螺体系不使用倍数词缀。若存在不同的编号顺序，可以参照 3.7.2.1. 节中的规则确定。

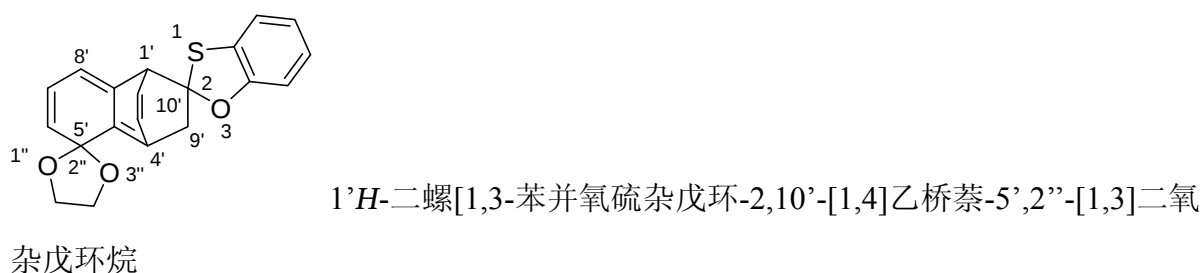
例：



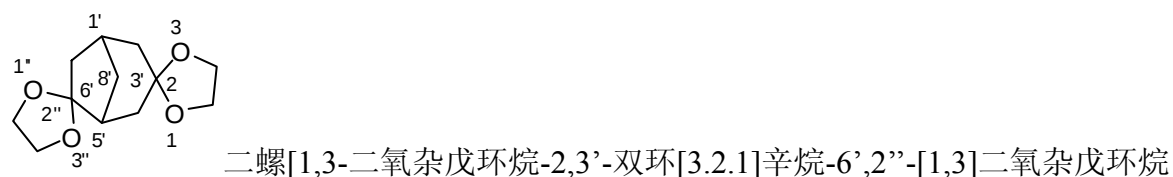
(dispiro[fluorene-9,1'-cyclohex[2]ene-4',1''-indene]), 而不是二螺[茛-1,1'-环己[2]烯-4',9''-]芴。芴 (fluorene) 优先于茛 (indene)。



(2''*H*,4''*H*-trispiro[cyclohexane-1,1'-cyclopentane-3',3''-cyclopenta[*b*]pyran-6'',1'''-cyclohexane]), 而不是2''*H*,4''*H*-三螺[环己烷-1,6'-戊环并[*b*]吡喃-3',1''-环戊烷-3'',1'''-环己烷]。环戊烷 (cyclopentane) 优先于戊环并[*b*]吡喃 (cyclopenta[*b*]pyran)。



(1'*H*-dispiro[1,3-benzoxathiole-2,10'-[1,4]ethanonaphthalene-5',2''-[1,3]dioxolane]), 而不是4'*H*-二螺[1,3-苯并氧硫杂戊环-2,9'-[1,4]乙桥萘-8',2''-[1,3]二氧杂戊环]。‘2,2'',5',10'' 优先于 ‘2,2'',8',9''’。



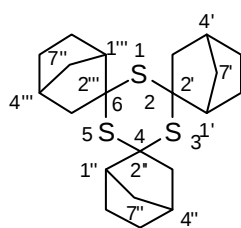
(dispiro[1,3-dioxolane-2,3'-bicyclo[3.2.1]octane-6',2''-[1,3]dioxolane], 而不是二螺[1,3-二氧杂戊环烷-2,6'-双环[3.2.1]辛烷-3',2''-[1,3]二氧杂戊环烷, 也不是二螺[双环[3.2.1]辛烷-3,2':6,2''-双([1,3]二氧杂戊环烷)]

(dispiro[bicyclo[3.2.1]octane-3,2':6,2''-bis([1,3]dioxolane)])。‘2,3',6',2''’优先于‘2,6',3',2''’。

3.7.2.4. 含有一个或一个以上多环组分环螺联至同一组分上的分叉多螺化合物

(1) 若一个中心组分同时与三个及其以上相同端基组分进行螺联, 该中心组分放在前面, 其位次编号不加撇。端基组分通过在其名称前加相应的前缀‘三’、‘四’等置于中心组分之后。端基组分编号依次加撇, 加两撇等。螺原子位次通过编号对标识, 编号对之间用冒号分隔。若存在额外氢, 将其置于整个名称最前端。若存在不同编号可能, 则参照3.7.2.1.节中的规则确定。

例:

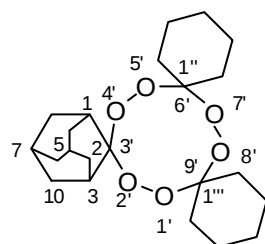


三螺[1,3,5-三硫(杂)己环-2,2':4,2'':6,2'''-三(双环[2.2.1]庚烷)]

(trispiro[1,3,5-trithiane-2,2':4,2'':6,2'''-tri(bicyclo[2.2.1]heptane)])

(2) 若两个及其以上不同端基组分螺联至同一中心组分, 则先给出字母顺序在先的端基组分名称, 然后是中心组分名称, 其后是按字母顺序排列的其它端基组分名称。

例:

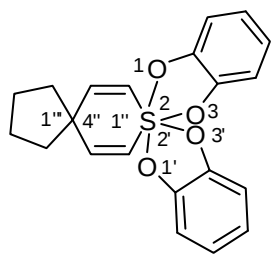


三螺[金刚烷-2,3'-[1,2,4,5,7,8]六氧杂壬环烷-6',1'':9',1'''-双(环己烷)] (优先推荐的命名)

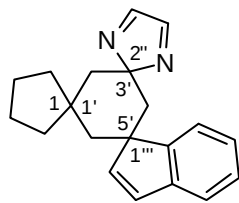
(trispiro[adamantane-2,3'-[1,2,4,5,7,8]hexoxonane-6',1'':9',1'''-bis(cyclohexane)]), 也可以命名为: 三螺[双(环己烷)-1,3'':1',6''-[1,2,4,5,7,8]六氧杂壬环烷-9'',2'''-三环[3.3.1.1^{3,7}]癸烷]

(trispiro[bis(cyclohexane)-1,3'':1',6''-[1,2,4,5,7,8]hexoxonane-9'',2'''-tricyclo[3.3.1.1^{3,7}]de

cane])。

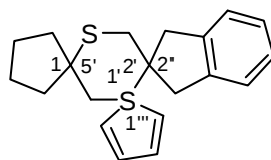


2λ⁶-二螺[双([1,3,2]苯并二氧杂硫杂戊环)-2,1'':2',1''-硫吡喃-4'',1'''-环戊烷 (2λ⁶-dispiro[bis([1,3,2]benzodioxathiole)-2,1'':2',1''-thiopyran-4'',1'''-cyclopentane])



三螺[环戊烷-1,1'-环己烷-3',2''-咪唑-5',1'''-茚]

(trispiro[cyclopentane-1,1'-cyclohexane-3',2''-imidazole-5',1'''-indene])



1'λ⁴-三螺[环戊烷-1,5'-[1,4]二噻烷-2',2''-茛烷-1',1'''-噻吩

(1'λ⁴-trispiro[cyclopentane-1,5'-[1,4]dithiane-2',2''-indane-1',1'''-thiophene]), 而不是 1'λ⁴-三螺[环己烷-1,3'-[1,4]二噻烷-6',2''-茛烷-1',1'''-噻吩, 也不是 4'λ⁴-三螺[环己烷-1,2'-[1,4]二噻烷-5',2''-茛烷-4',1'''-噻吩。‘1,1',1''',2',2'',5'’ 优先于 ‘1,1',1''',2',3'', 也优先于 ‘1,1''',2',2'',4',5'’。

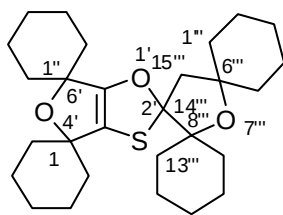
3.7.2.5. 含有一个或一个以上多环组分环螺联至非同一起分上的分叉多螺化合物

若 3.7.2.4.节所述分叉多螺环系上进一步螺联, 或其他含多环组分的分叉多螺环系时, 可按下述规则进行命名。

(1) 任何螺联在一起的单环组分在命名时作为一个整体(单元), 其应包含最大数目的单环组分(见 3.7.2.1.节)。该单元作为一个组分用于进一步的螺联命名。为显示名称的复合性, 在起始的‘多螺’前缀的后面加大括号(取代方括号), 将那些其中至少有一已经螺联的组分包括进来。

(2) 若该化合物不是由单环组分组成的多螺体系, 或者该体系不能用一般的螺联规则进行命名(参见 3.7.2.2.~3.7.2.4.节), 则先对最大的螺系进行命名, 并将该螺系作为一个单元用于进一步的螺联。该单元中的加撇在余下的命名中延续。

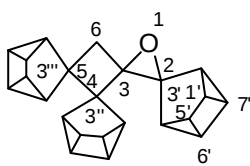
例:



三螺{双(环己烷)-1,4':1'',6'-呋喃并[3,4-*d*][1,3]氧硫杂戊环

-2',14'''-[7]氧杂二螺-[5,1,5,2]十五烷}

(trispairo{bis(cyclohexane)-1,4':1'',6'-furo[3,4-*d*][1,3]oxathiole-2',14'''-[7]oxadispiro-[5,1,5,2]pentadecane})。



三螺{1-氧杂螺[2.3]己烷-2,3':4,3'':5,3'''-三(四环[3.2.0.0^{2,7}.0^{4,6}]庚烷)}

(trispairo{1-oxaspiro[2.3]hexane-2,3':4,3'':5,3'''-tris(tetracyclo[3.2.0.0^{2,7}.0^{4,6}]heptane)})。

3.8. 联环 (Ring assemblies) 母体氢化物

两个或更多环系 (单环或双环) 通过双或单键直接相连, 且此种键联的数目较连接的环系数少一, 此称为联环母体氢化物。如环系间由两键相连者, 则不归入联环环系, 如并环环系的联二苯叉(基)。

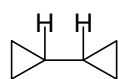
3.8.1. 相同环系的联环母体氢化物

3.8.1.1. 两个相同环系的联环母体氢化物

可按下述两个方式之一进行命名: (1) 将前缀‘二联’置于所连环系的基名前, 必要时环系基名加括号 (加合名命名方式), ‘二’字可省略; (2) 将前缀‘二联’置于所连环系的母体氢化物名前, 必要时环系基名加括号 (缀合名命名方式), ‘二’字可省略。

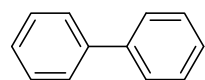
联环环系仍保留原所连环系的编号体系, 一个用不带撇的数字, 另一用带撇的数字, 连接点用相应的位次标在名称前。

例:



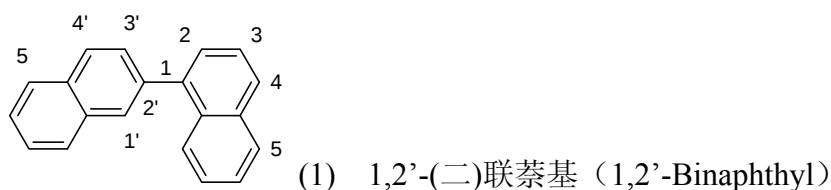
(1) 1,1'-(二)联(环丙基) (1,1'-Bi(cyclopropyl))

(2) 1,1'-(二)联(环丙烷) (1,1'-Bi(cyclopropane))

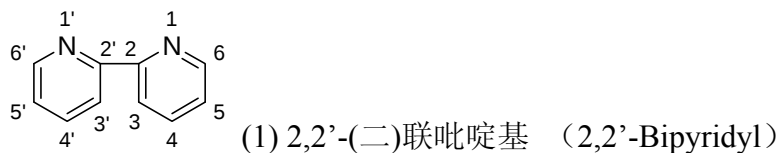


(1) (二)联苯基 (Biphenyl)

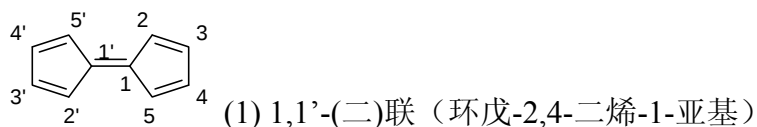
(2) (二)联苯 (英文不使用 Bibenzene)



(2) 1,2'-(二)联萘 (1,2'-Binaphthalene)



(2) 2,2'-(二)联吡啶 (2,2'-Bipyridine)



(1,1'-Bi(cyclopenta-2,4-dien-1-ylidene))

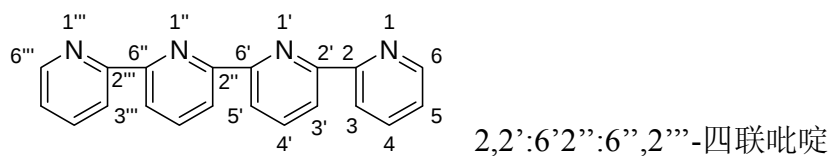
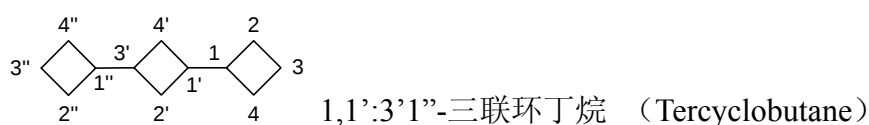
3.8.1.1. 三或三以上个相同环系不分叉的联环母体氢化物

以前缀‘三联’、‘四联’、‘五联’等置于相连母体氢化物名称前来命名。

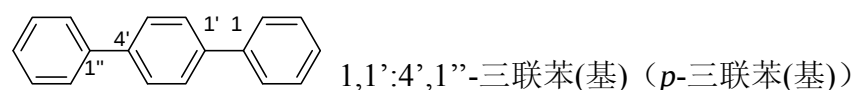
联环环系仍保留原所连环系的编号体系，第一个位次数字用不带撇的，第二用带撇的，第三个带二撇，并依此类推，连接点用相应的位次标在名称前，各连接点间用冒号分开。

六联以上的联环母体氢化物也可采用蕃的命名方式命名。(参见 3.9.节)

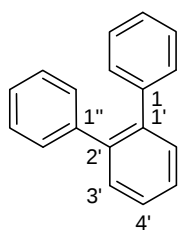
例：



(2,2':6'2'':6'',2'''-Quaterpyridine)

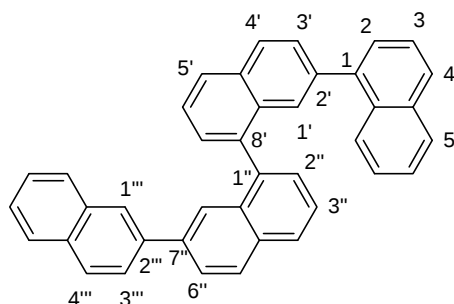


(1,1':4',1''-Terphenyl (*p*-Terphenyl))



1,1':2',1''-三联苯(基) (*o*-三联苯(基))

(1,1':2',1''-Terphenyl (*o*-Terphenyl))



1,2':8'.1'':7'',2'''-四联萘

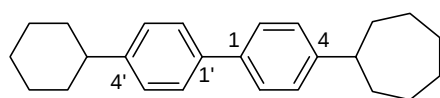
(1,2':8'.1'':7'',2'''-Quaternaphthalene)

3.8.2. 不同环系的联环母体氢化物

不同环系的联环母体氢化物命名时，选择其中之一的环系名为主体，而其余的环系作为取代基进行安排，主体环系的选择则按下列规则逐条依次确定：

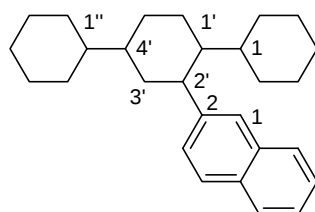
- (1) 所含环数最多者；
- (2) 所含环最大者；
- (3) 不饱和度最大者；
- (4) 3.5.节中基本碳环表中处于最高位者。

例：



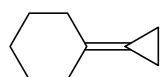
4-环庚基-4'-环己基(二)联苯(基)

(4-Cycloheptyl-4'-cyclohexylbiphenyl)

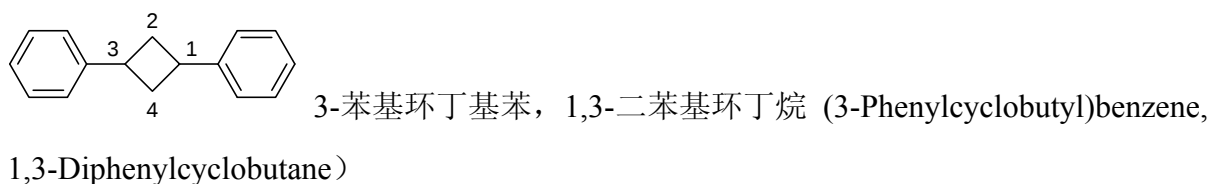
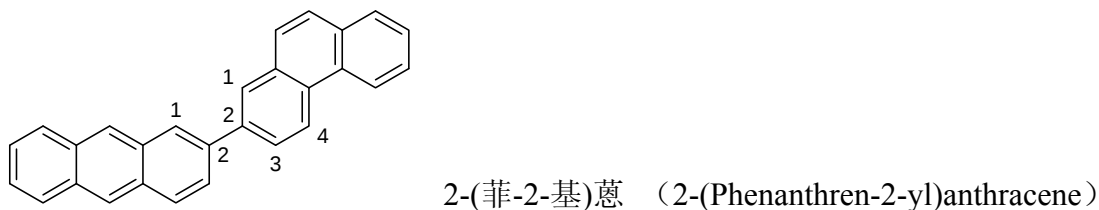
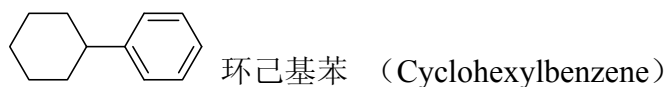
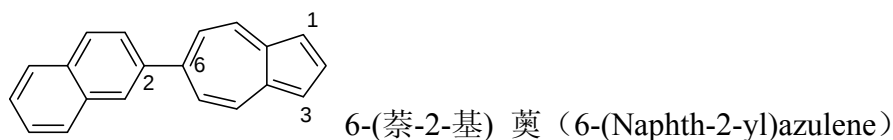


2'-(萘-2-基)-1,1':4',1''-三联环己烷

(2'-(Naphth-2-yl)-1,1':4',1''-tercyclohexane)



环丙亚基环己烷 (Cyclopropylidenecyclohexane)



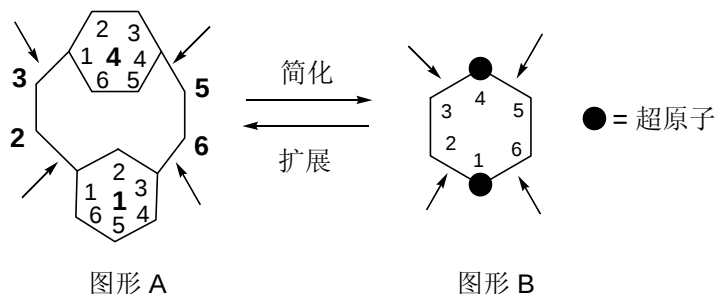
3.9. 蕃 (Phanes) 母体氢化物

‘蕃’是 IUPAC 1998 年明确建议的一类复杂环系的类名^{[3.9-1], [3.9-2]}, 虽然其中的‘环蕃’ (Cyclophane) 名称早在五、六十年代即已在文献上出现, 但大致仅局限于一些较特殊的结构类型。多个环或环系通过原子链连接成链或环者可总称为蕃, 其中成环者称为环蕃。虽然蕃类环系的命名也可通过其中的其它环系母体氢化物进行, 但一般情况下用蕃母体氢化物命名将较为简单明了。

3.9.1. 定义和术语

简化与扩展

蕃命名中基本的操作法如下图所示。图中从左到右的操作过程为“简化 (simplification)”, 从右到左的操作过程为“扩展 (amplification)”或“蕃置换”。



简化操作是命名蕃主体名称的第一步, 是将复杂环结构中一些在命名上紧要的片段用称作‘超原子’的单个‘原子’所取代, 得到一个易于命名的简化骨架。蕃母体氢化

物的名称则由各组分的名称组合而成，其中“简化母体骨架”为其提供蕃骨架名称，再加上蕃母体氢化物在简化操作中被取代的扩展体的结构名称。相比与扩展相关的其它键，上图中箭头指示的键在简化或扩展操作中并未消失。

蕃母体氢化物的简化骨架、简化蕃母体图形、简化骨架名和骨架位次

上图中的图形 B 表示该蕃母体氢化物的“简化骨架”，为简化蕃母体图形，它的名称为简化骨架名，其上的编号位次为骨架位次，也即为蕃母体氢化物命名中的基本位次。

超原子和超原子位次

上图中图形 B（简化骨架）上 1,4 位上用大号黑体圆点显示的原子称为“超原子”，它仅在简化蕃母体图形中出现，它的位次称“超原子位次”。

扩展体、扩展前缀、扩展体位次

在扩展操作中，用于置换超原子的多原子结构单元称为“扩展体”，如上图图形 A 中的六元环。它们在蕃母体命名中通过“扩展前缀”来表达，扩展体本身的编号称‘扩展体位次’，如上图图形 A 中的小号数字。

接合原子、接合位次

扩展体与上图中箭头标识的键相连接处的原子称为“接合原子”，该原子的位次就称为“接合位次”。图中上部扩展体的接合位次为“1,4”，下面扩展体的接合位次为“1,3”。

蕃母体骨架、蕃母体名称、蕃母体氢化物

上图中图形 A 称“蕃母体骨架”，简化骨架（母体）名加上扩展前缀以及超原子位次和接合位次即构成“蕃母体名称”，若不存在其它组分，该结构代表的化合物即为“蕃母体氢化物”。

3.9.2. 蕃母体命名的组成

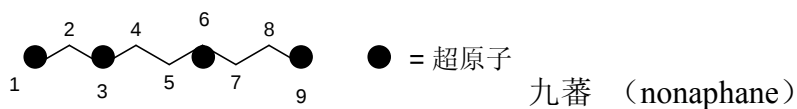
蕃母体命名包括先确定蕃的简化骨架名，引入扩展前缀，最后再在前面加上超原子的位次和扩展体的接合位置位次。

3.9.2.1. 蕃的简化骨架名

（1）直链蕃的简化骨架名由词根‘蕃’（phane）加表示该结构中节点数目的中文数字

为前缀所组成。其位次编号方式与直链烃类似，从一端至另一端，并使此时超原子的位次组最小。

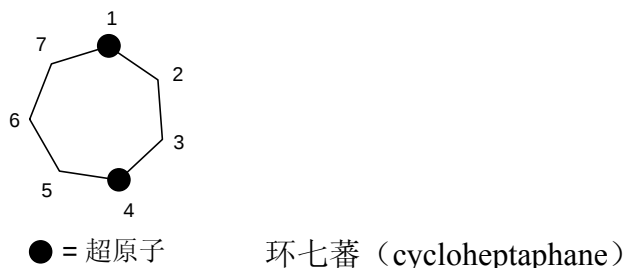
例：



该命名中，‘九 (nona)’表示该结构中有九个节点，‘蕃 (phane)’表示该结构中至少有一个节点代表多原子并成环的结构单元(超原子)。位次组 ‘1,3,6,9’ 低于 ‘1,4,7,9’，因此采用这一编号方式。

(2) 单环蕃的简化母体骨架的命名，先给出前缀 ‘环 (cyclo)’，后加以相应节点的直链蕃简化骨架名，环中节点也顺序编号，并使环中超原子编号位次组小。

例：



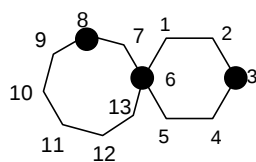
(3) 桥环型多环蕃的简化母体骨架的命名参考扩展的 von Baeyer 桥环系统命名法进行 (见 3.6 节)，并使环中超原子编号位次组小。

例：



(4) 螺环型多环蕃的简化母体骨架的命名参考相应螺烃化合物的命名规则进行命名 (见 3.7 节)，并使超原子编号位次组小。

例：



● = 超原子

螺[5.7]十三蕃 (Spiro[5.7]tridecaphane)

3.9.2.2. 蕃的扩展前缀

蕃结构中的超原子（环或环系）在蕃的命名中，是以扩展前缀的方式加在简化骨架名前来表达。此扩展前缀名取自该扩展体所相应的环状母体氢化物名，并在其后加‘杂’（英文加字母 a）而构成，如‘苯杂’（benzena），‘呋喃杂’（furana），‘吡啶杂’（pyridina），‘吡咯杂’（pyrrola）等。

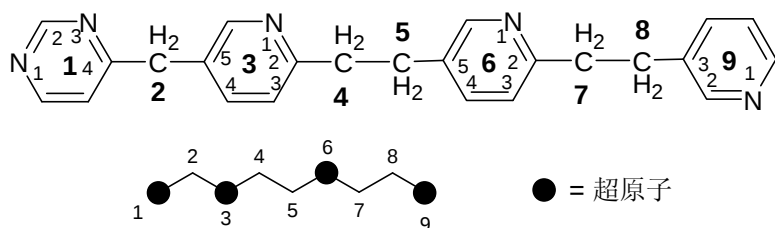
含最大非积累双键数的单环或多环（慢环(mancude)）、并环体系、饱和单环、饱和双环烷烃和多环烷烃（桥环）以及螺烃等环状母体氢化物名加‘杂’后即可作为扩展前缀。但一些用骨架置换操作法（杂(a)）命名的杂环，如 1-氮杂双环[2.2.2]辛烷（1-azabicyclo[2.2.2]octane）；带取代基的俗名，如苯乙烯；官能团类别名命名法和缀合名命名法给出的名称，如苄氯和苯乙酸；以及带表示氢化程度前后缀的环名，如 9,10-二氢蒽和环己烯；这些环名都不能直接用在扩展前缀中，而需采用它们相应的烃、饱和烃或慢环的名称，然后再在蕃的完整名称的前缀中作进一步的表达。

在蕃母体名称中含有两个及以上扩展前缀时，其引用次序由环或环系的优先顺序决定。其顺序标准有：

- (1) 杂环优先于碳环；如吡啶优先于苯。
- (2) 含杂原子的杂环的优先次序为：N>O>S>Se>Te>P>As>Sb>Bi>Si>Ge>Sn>Pb>B。
如吡咯>呋喃>噻吩。
- (3) 环数较大者优先。如喹啉>嘧啶；菲>萘>苯。
- (4) 环或环系中环大者（环原子数较多的）优先。首个不同处最大的单体环原子数较多的环（环系）优先。如，萘>茚；吡啶>1,2-噻唑。
- (5) 不论类型，杂原子较多的环（环系）优先。如，嘧啶>吡啶；1,2,5-噁二唑>吡咯。
- (6) 氢化程度较低的环（环系）优先。如，吡啶>哌啶；苯>环己烷。

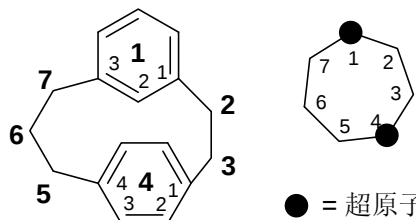
在蕃母体骨架中存在不止一个相同扩展体时，则在此扩展体的名称前加倍数前缀‘二’、‘三’等标识。相同扩展体不必具有相同的接合位次编号。

例：



1(4)-嘧啶杂-3,6(5,2),9(3)-三吡

啉杂九蕃 (1(4)-pyrimidina-3,6(5,2),9(3)-tripyridinanonaphane)



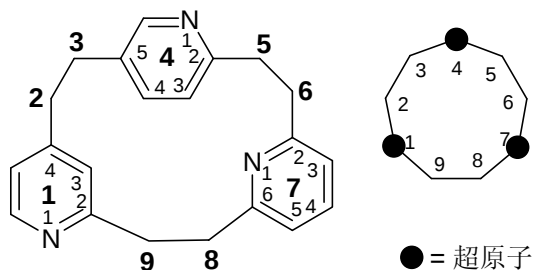
1(1,3),4(1,4)-二苯杂环七蕃

(1(1,3),4(1,4)-dibenzenacycloheptaphane)

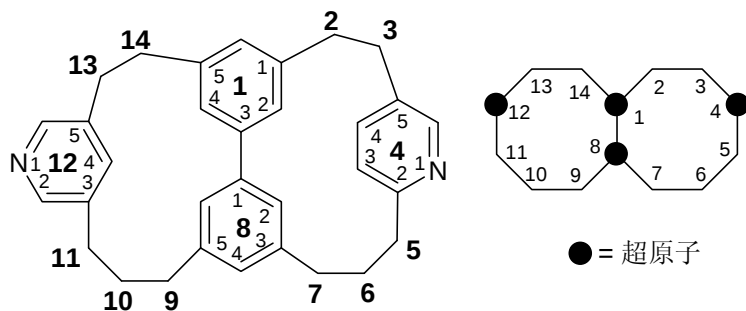
3.9.2.3. 超原子位次和扩展体接合位置位次

超原子位次编号置于相应的扩展前缀前，此编号后用括号数字标明该扩展体中接合位置的位次。接合位置相同的多个相同扩展体，在命名时接合位置位次仅需引用一次，置于相应超原子编号组的后面。表示超原子位次的编号数字采取递增排列，扩展体接合位置位次则与蕃母体骨架位次低者相连的接合位次在前。

例：

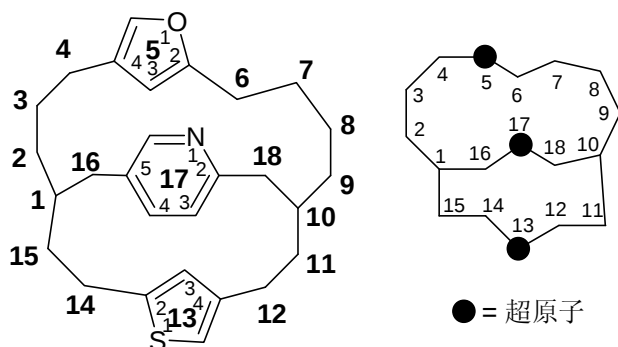


1(4,2),4(5,2),7(2,6)-三吡啶杂环九蕃 (1(4,2),4(5,2),7(2,6)-tripyridinacyclononaphane)



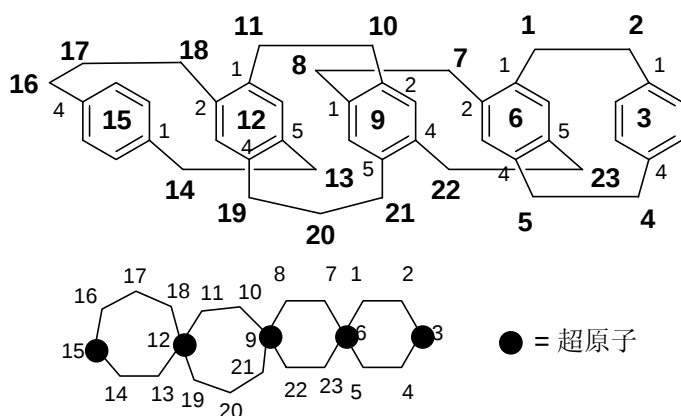
4(5,2),12(3,5)-二吡啶杂-1,8(1,3,5)-二苯杂双环[6.6.0]十四蕃

(4(5,2),12(3,5)-dipyridina-1,8(1,3,5)-dibenzenabicyclo[6.6.0]tetradecaphane)



17(5,2)-吡啶杂-5(4,2)-呋喃杂-13(4,2)噻吩杂双环[8.5.3]十八蕃

(17(5,2)-pyridina-5(4,2)-furana-13(4,2)-thiophenabicyclo[8.5.3]octadecaphane)



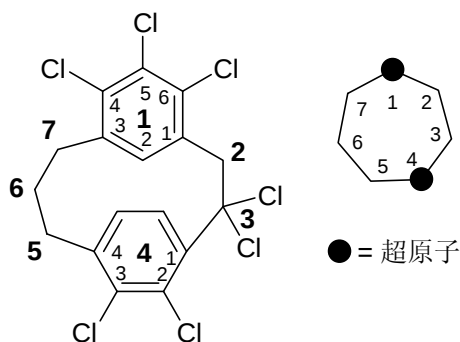
3,15(1,4),6(1,4,2,5),9(1,2,5,4),12(1,5,2,4)-五苯杂三螺[5.2.2.6¹²,3⁹,2⁶]二十三蕃

(3,15(1,4),6(1,4,2,5),9(1,2,5,4),12(1,5,2,4)-pentabenzenatrispiro[5.2.2.6¹²,3⁹,2⁶]tricosaphane)

3.9.2.4. 蕃母体氢化物的编号

在蕃母体氢化物中，非扩展体的原子编号就是简化蕃骨架的编号。而扩展体上原子的编号则以代表该扩展体的超原子编号的上标形式（复合编号）进行标识。

例：



1⁴,1⁵,1⁶,3,3,4²,4³-七氯-1(1,3),4(1,4)-二苯杂环七蕃

(1⁴,1⁵,1⁶,3,3,4²,4³-heptachloro-1(1,3),4(1,4)-dibenzenacycloheptaphane)

3.9.3. 蕃命名中杂原子置换，额外氢，氢化程度和官能性母体的命名法

3.9.3.1. 含杂原子的蕃母体氢化物置换命名法

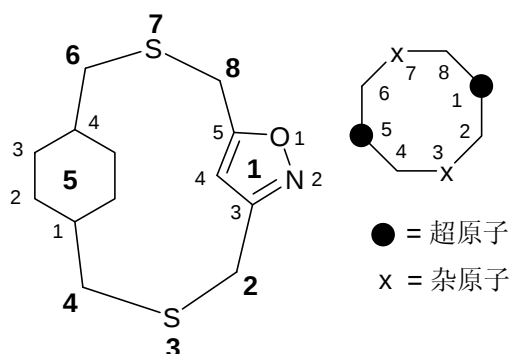
蕃母体氢化物骨架中的杂原子以及杂原子未在扩展前缀名中表述的杂环扩展体，均需采用置换命名法在蕃母体氢化物的扩展前缀前给予标明。命名分二步：

步骤 1：用允许使用的扩展体名称，以及在不允许使用杂环扩展体名称时则用相应的碳氢环名称，一起构建出蕃母体氢化物名称；

步骤 2：应用骨架置换命名法在步骤 1 中得到的蕃母体氢化物名称中引入未曾包括在内的杂原子。杂原子的位次编号则根据简化骨架中的编号及杂原子在扩展体中的位置，使用上节（3.9.2.4. 节）的编号规则进行编号。因此，扩展体中杂原子的位次使用复合编号进行标示。

若编号上有不同方式选择时，则采用有机化合物命名中的一般规则进行，如高位杂原子优先编号的规则，杂原子位次组小者优先的规则。

例：

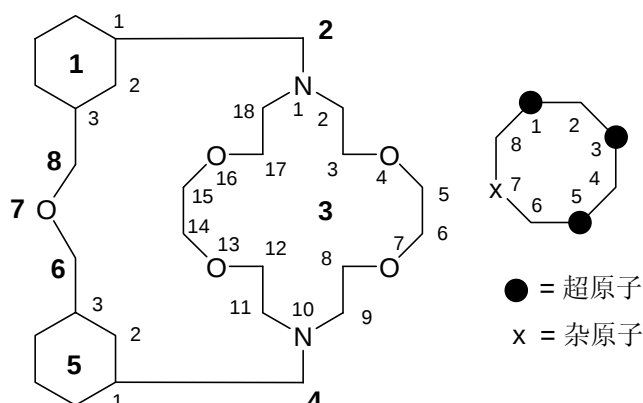


步骤1：1(3,5)-1,2-噁唑杂-5(1,4)-环己烷杂环八蕃

(1(3,5)-1,2-oxazola-5(1,4)-cyclohexanacyclooctaphane)；

步骤 2：3,7-二硫杂-1(3,5)-1,2-噁唑杂-5(1,4)-环己烷杂环八蕃

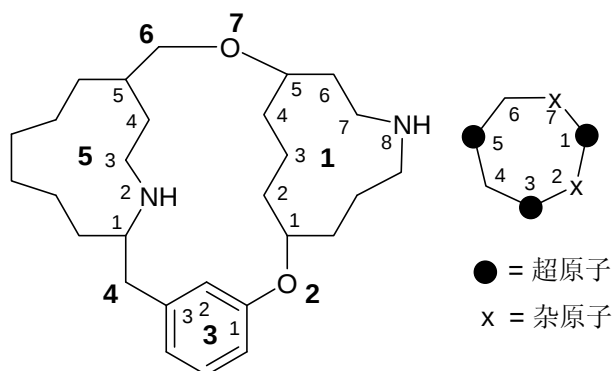
(3,7-dithia-1(3,5)-1,2-oxazola-5(1,4)-cyclohexanacyclooctaphane)



步骤1: 3(1,10)-环十八烷杂-1,5(1,3)-二环己烷杂环八蕃

(3(1,10)-cyclooctadecana-1,5(1,3)-dicyclohexanacyclooctaphane)

步骤2: $3^4, 3^7, 3^{13}, 3^{16}, 7$ -五氧杂- $3^1, 3^{10}$ -二氮杂-3(1,10)-环十八烷杂-1,5(1,3)-二环己烷杂环八蕃
($3^4, 3^7, 3^{13}, 3^{16}, 7$ -penta-oxa- $3^1, 3^{10}$ -diaz-3(1,10)-cyclooctadecana-1,5(1,3)-dicyclohexanacyclooctaphane)

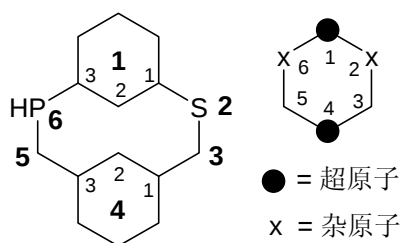


步骤1: 1,5(1,5)-二环十一烷杂-3(1,3)-苯杂环七蕃

(1,5(1,5)-dicycloundecana-3(1,3)-benzenacycloheptaphane);

步骤2: 2,7-二氧杂- $1^8, 5^2$ -二氮杂-1,5(1,5)-二环十一烷杂-3(1,3)-苯杂环七蕃

(2,7-dioxa- $1^8, 5^2$ -diaz-1,5(1,5)-dicycloundecana-3(1,3)-benzenacycloheptaphane)。



步骤1: 1,4(1,3)-二环己烷杂环六蕃 (1,4(1,3)-dicyclohexanacyclohexaphane);

步骤2: 2-硫杂-6-磷杂-1,4(1,3)-二环己烷杂环六蕃

(2-thia-6-phospha-1,4(1,3)-dicyclohexanacyclohexaphane)。

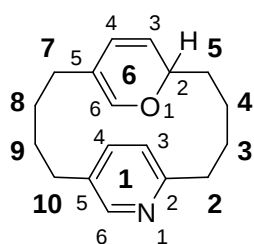
不能命名为: 6-硫杂-2-磷杂-1,4(1,3)-二环己烷杂环六蕃

(6-thia-2-phospha-1,4(1,3)-dicyclohexanacyclohexaphane)，因为硫原子优先于磷原子，硫原子应当给予较小编号。

3.9.3.2. 蕃母体氢化物中额外氢，氢化程度以及词尾烯炔的命名方法

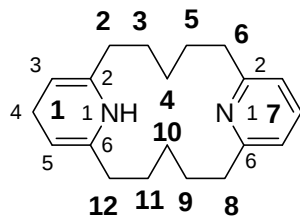
额外氢，氢化程度的标明以及词尾烯炔的命名采用一般有机化合物命名时的同样方式和规则，仅涉及扩展体时位次采用复合编号进行标识。

例:



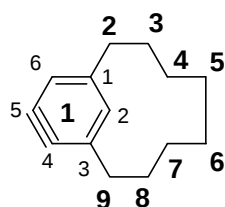
6²H-1(2,5)-吡啶杂-6(2,5)-吡喃杂环十蕃

(6²H-1(2,5)-pyridina-6(2,5)-pyranacyclodecaphane)



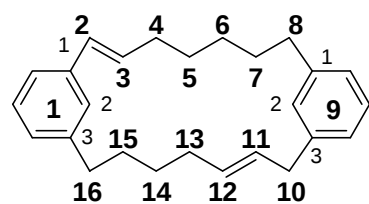
1¹,1⁴-二氢-1,7(2,6)-二吡啶杂环十二蕃

(1¹,1⁴-dihydro-1,7(2,6)-dipyridinacyclododecaphane)



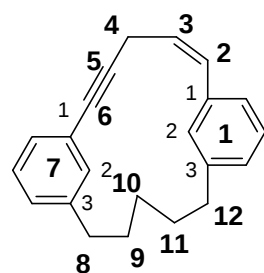
1⁴,1⁵-二脱氢-1(1,3)-苯杂环九蕃

(1⁴,1⁵-didehydro-1(1,3)-benzenacyclononaphane)



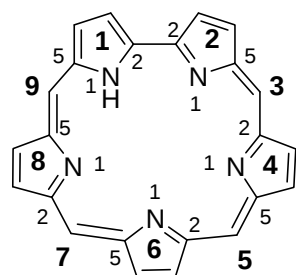
1,9(1,3)-二苯杂环十六蕃-2,11-二烯

(1,9(1,3)-dibenzenacyclohexadecaphane-2,11-diene)



1,7(1,3)-二苯杂环十二蕃-2-烯-5-炔

(1,7(1,3)-dibenzenacyclododecaphan-2-en-5-yne)



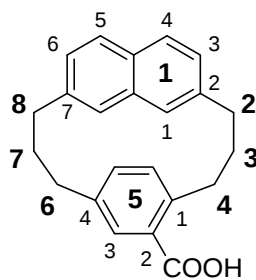
1¹H-1,2,4,6,8(2,5)-五吡咯杂环九蕃-2⁵(3),4⁵(5),6⁵(7),8⁵(9)-四烯

(¹H-1,2,4,6,8(2,5)-pentapyrrolacyclononaphane-2⁵(3),4⁵(5),6⁵(7),8⁵(9)-tetraene)

3.9.3.3. 蕃官能性母体的命名法

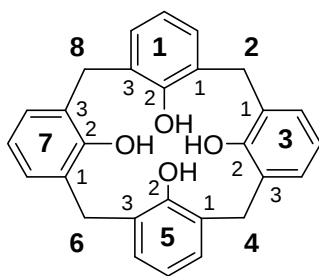
蕃官能性母体命名也与一般有机化合物命名时一样，将特性基团作为后缀置于蕃后，并给予尽可能低的位次，特性基团在扩展体上时位次采用复合编号。

例：



1(2,7)-萘杂-5(1,4)-苯杂环八蕃-5²-甲酸

(1(2,7)-naphthalena-5(1,4)-benzenacyclooctaphane-5²-carboxylic acid)



1,3,5,7(1,3)-四苯杂环八蕃-1²,3²,5²,7²-四醇

(1,3,5,7(1,3)-tetrabenzenacyclooctaphane-1²,3²,5²,7²-tetrol)

3.9 节参考文献

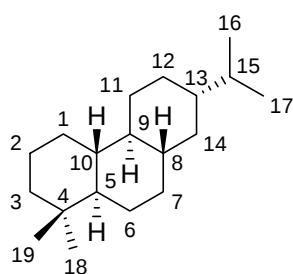
[1] IUPAC Recommendations 1998: Phane Nomenclature, Part I: Phane Parent Names, *Pure Appl. Chem.* **1998**, 70, 1513-1545.

[2] IUPAC Recommendations 2002: Phane Nomenclature, Part II: Modification of the Degree of Hydrogenation and substitution Derivatives of Phane Parent Names, *Pure Appl. Chem.* **2002**, 74, 809-834.

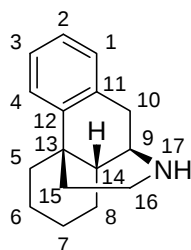
3.10. 天然产物母体氢化物

天然存在的有机化合物数量巨大，结构纷繁复杂，但还是可以按照它们的基本结构分成各个类别，每个类别都有一个立体构型尽可能明确的共同母体氢化物，该母体氢化物具该类天然产物分离时和后来逐步定下的半系统名（或称半俗名），并带有确定的编号系统。

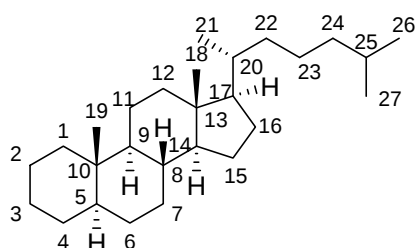
例：



松香烷 (Abietane)



吗啡烷 (Morphinan)



5 α -胆甾烷 (5 α -Cholestane)

一些主要类别的天然产物母体氢化物和天然产物的命名规则见第 8 章。

3.11. 由母体氢化物衍生的取代基命名

母体氢化物失去一或更多氢后形成带相应游离价键的结构单元，采用加后缀‘基’等方式进行命名，与不同游离价键相应的后缀见下表。

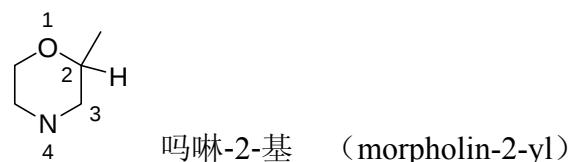
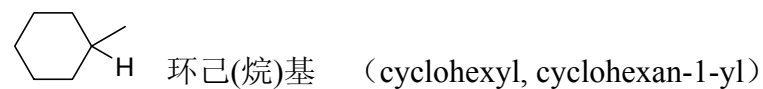
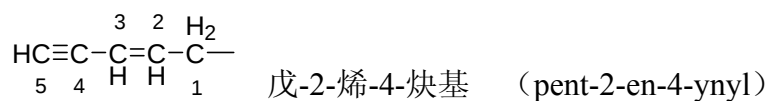
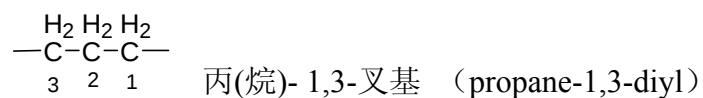
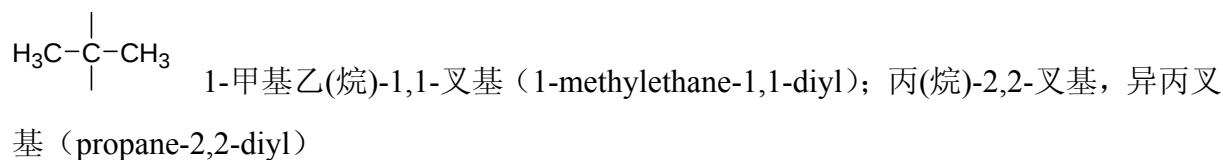
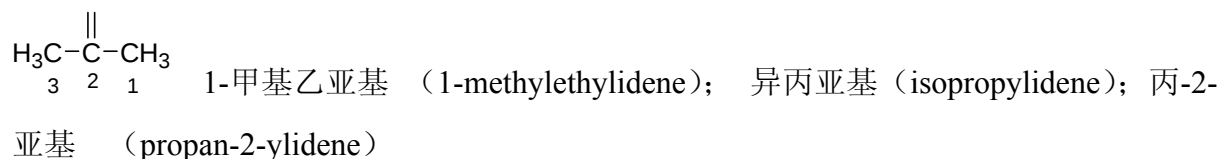
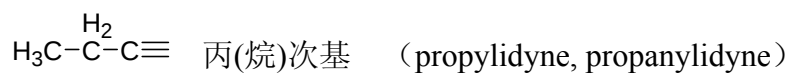
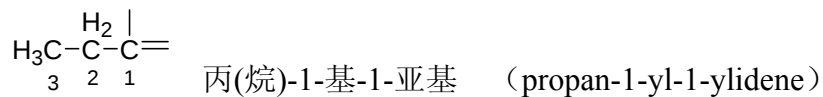
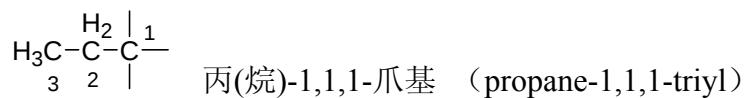
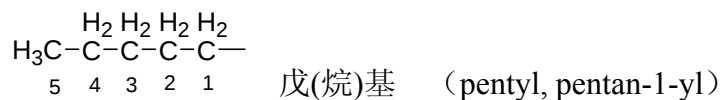
游离价键数	结构示意	中文后缀	英文后缀	注
单价	[C]-	基	-yl	
二价	-[C]-	叉基	-diyl	二种二价基可通称亚基 (-ylene)
	[C]=	亚基	-ylidene	指双键
三价	-[C]<	爪基	-triyl	三种三价基可通称次基
	[C] $\equiv$	次基	-ylidyne	指叁键
	-[C]=	基亚基	-ylylidene	
四价	>[C]<	肆基	-tetrayl	
	-[C] $\equiv$	基次基	-ylylidyne	

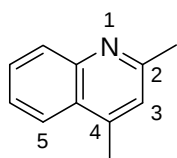
	=[C]=	双亚基	-diylidene	
	>[C]=	叉基亚基	-diylidene	

母体氢化物衍生的取代基命名时，在母体氢化物名称后，相应的后缀基前标注位次。

1-位基时，位次可省略，烷烃衍生的各种取代基名中，中文天干烷烃的烷字可省略。

例：





喹啉-2,4-叉基 (2,4-quinolinediyl)

除按上述规则命名母体氢化物衍生的取代基外，还存在三类以俗名命名的取代基：

- (1) 取代基上还可以有其它取代基。
- (2) 取代基中的环上还可以有其它取代基。
- (3) 取代基中不能有其它取代基，此俗名只能用于该取代基本身。

英文命名中有较多这些俗名命名的取代基，但在中文中仅部份保留相应的俗名，其余则采用系统命名，详见下表：

取代基	类别	英文俗名	中文系统名	中文俗名	注
-CH ₂ -	1	Methylene	甲叉基	亚甲基	
-CH ₂ -CH ₂ -	1	Ethylene	乙-1,2-叉基	亚乙基	
CH ₂ =CH-	1	Vinyl	乙烯基		
CH ₂ =CH-CH ₂ -	1	Allyl	丙-2-烯基	烯丙基	
C ₆ H ₅ -	1	Phenyl	苯基		
-C ₆ H ₄ -	1	Phenylene	苯叉基		
C ₆ H ₅ -CH ₂ -	2	Benzyl	苯甲基	苄基	
C ₆ H ₅ -CH=	2	Benzylidene	苯甲亚基	苄亚基	
C ₆ H ₅ -CH=CH-	2	Styryl	苯乙烯基		
C ₆ H ₅ -CH ₂ -CH ₂ -	2	Phenethyl	苯乙基		
C ₆ H ₅ -CH ₂ =CH-CH ₂ -	2	Cinnamyl	3-苯基丙-2-烯基	肉桂基	
(C ₆ H ₅) ₂ CH-	2	Benzhydryl*	二苯甲基		
(C ₆ H ₅) ₃ C-	2	Trityl	三苯甲基		
(CH ₃) ₂ CH-	3	Isopropyl	丙-2-基	异丙基	
(CH ₃) ₂ C=	3	Isopropylidene	丙-2-亚基	异丙亚基	
CH ₂ =C(CH ₃)-	3	Isopropenyl	丙-1-烯-2-基	异丙烯基	
(CH ₃) ₂ CH-CH ₂ -	3	Isobutyl*	3-甲基丙基	异丁基	
CH ₃ -CH ₂ -CH(CH ₃)-	3	sec-Butyl*	1-甲基丙基	仲丁基	

$(\text{CH}_3)_3\text{C}-$	3	<i>tert</i> -Butyl	1,1-二甲基乙基	叔丁基	
$\text{CH}_3-\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2-$	3	Crotyl, Crotonyl	丁-2-烯基	巴豆基	
$(\text{CH}_3)_2\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$	3	Isopentyl*	4-甲基丁基	异戊基	
$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{C}(\text{CH}_3)_2-$	3	<i>tert</i> -Pentyl*	1,1-二甲基丙基	叔戊基	
$(\text{CH}_3)_3\text{C}-\text{CH}_2-$	3	Neopentyl*	2,2-二甲基丙基	新戊基	
$\text{CH}_3-\text{C}_6\text{H}_4-$	3	Tolyl	甲苯基		
$2,4,6-(\text{CH}_3)_3\text{C}_6\text{H}_2-$	3	Mesityl	2,4,6-三甲苯基		

* IUPAC-2013 不建议继续使用此类俗名。

第4章 特性基团（官能(基)团）（Characteristic (functional) groups）

替代氢而连接在母体氢化物上的一些结构片段称为取代基，有机化合物的名称即由母体氢化物的名称加这些取代基的名称为前缀或后缀所构成。取代基与母体以非碳—碳键相联者习惯上称作特性基团（或官能(基)团），如-OH，=O，和-NH₂，但也并不尽然，这种例外如取代基-COOH，-CN。也许此时也可将具官能性的概念归纳为基团中存在有杂原子和/或不饱和度，但这定义也还是不十分精确。

碳—碳不饱和结构在非环化合物中可看作一种具官能性的基团，但在具最大非累积双键数的环状化合物（慢环(mancude-ring)）中，当选择母体结构时，它就只是母体氢化物本身的组成部份，但是在编号等一些场合下，它又会作为基团来对待。

官能性母体，具离子中心或自由基中心的结构单元在化合物命名中的处理问题也将在本章中讨论。

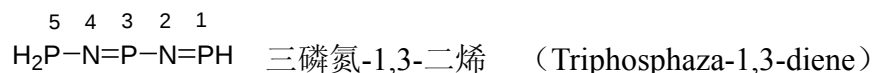
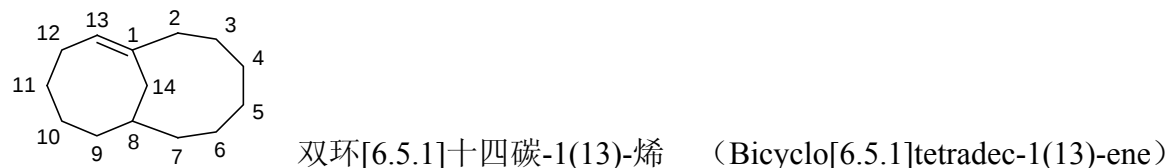
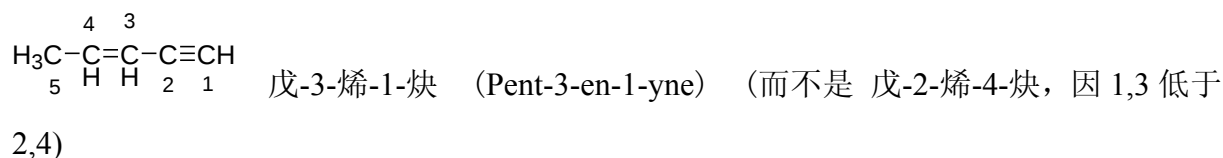
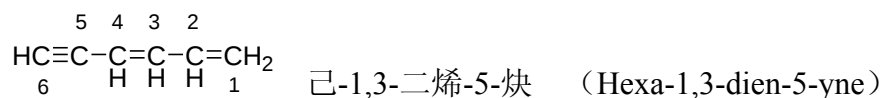
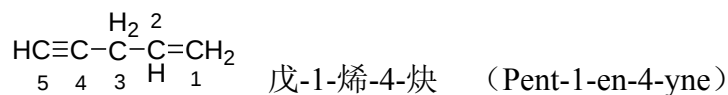
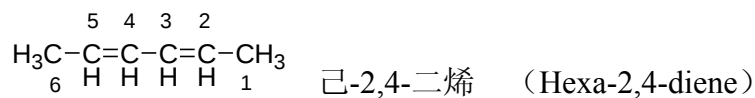
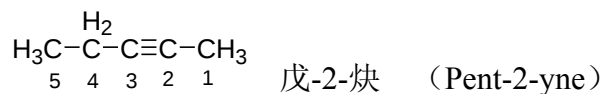
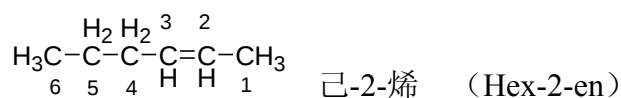
4.1. 不饱和基团（Unsaturation）

母体氢化物可分成二类，完全饱和的和完全不饱和的。完全不饱和的环状母体氢化物通常定义为具最大非累积双键数的环状氢化物（慢环(mancude-ring)）。这二类母体氢化物中饱和程度，也即氢化程度的处理是有别于其它的官能(基)团，其区别则在于选择哪一类母体氢化物和编号。

4.1.1. 命名含重键结构的后缀

原本完全饱和的母体氢化物如出现一个或多个双键或叁键时，则将本来名称的后缀‘烷’改为烯或炔，或在同时存在双、叁键时改为烯炔，炔字在后，对超过十个碳原子的不饱和的母体氢化物中文数字名后，烯炔字前加‘碳’字。当存在二个以上双、叁键时，相应字前用中文数字标明它们的数目。这些重键的位置以它们在母体氢化物中的位次来标明，取二个数字中小的数字置于相应的烯、炔前。母体氢化物编号方式如有不同选择时，则采取最低的数字位次组（参见 1.4.4.2 节），当数字位次相同时，采用双键具有低位次的编号方式。当重键中第二个原子的位次编号并非紧连的数字时，则需在标明该重键位次的数字后用括号标出。（1980 年中国化学会有机化学命名原则中将重键的位次编号置于母体名称之前，而第二种重键的位次编号置于后缀烯、炔前。本建议则按 IUPAC 新规一律置于相应的烯、炔前。）

例：

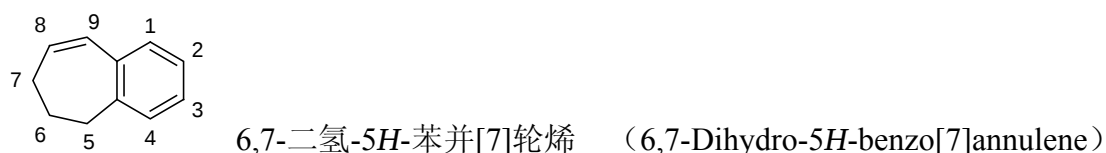
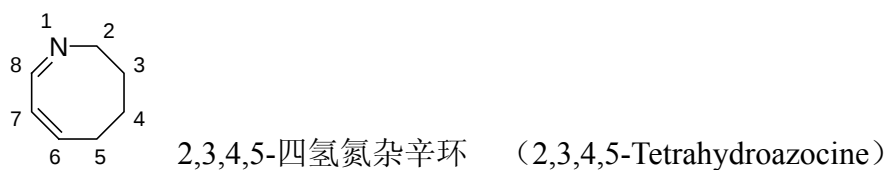
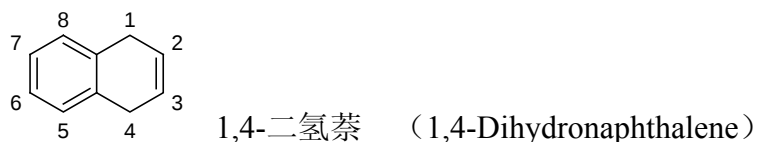


有关不饱和基团在命名中进一步的安排见第 5, 6 章。

4.1.2. 命名中加氢的前缀

如母体氢化物的名称中含最大非累积双键数的环状结构(烷环(mancude-ring)), 而其氢化状态有变时, 则命名中加前缀氢化, 氢化前加数字标明饱和的程度, 氢化的‘化’字通常可省略, 而氢化的数字总是偶数(如二氢(化)-, 四氢(化)-等), 本来命名中标明的额外氢(Indicated hydrogen, 参见 2.3 节)仍保留。氢化前缀为不可分前缀, 即应直接置于母体氢化物名称前, 但当有额外氢时, 则置于额外氢前。

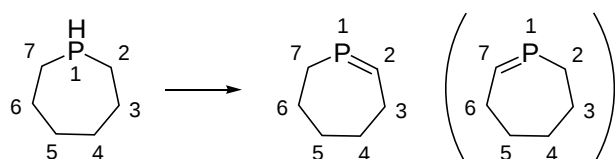
例：



4.1.3. 命名中脱氢的前缀

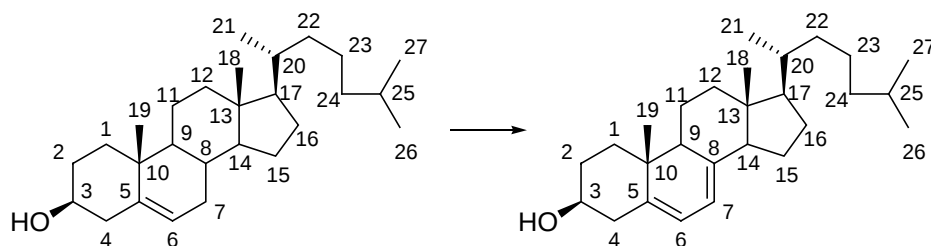
母体氢化物的名称中未包含的双键出现时，则需用前缀‘双脱氢’来标明，‘双脱氢’指脱去一对氢原子。相应地，双键转化为叁键时也可用前缀‘双脱氢’来标明。脱氢前缀同氢化前缀，均为不可分前缀。

例：



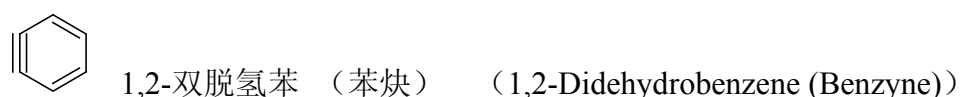
磷杂环庚烷→1,2-双脱氢磷杂环庚烷 (3,4,5,6-四氢-2H-磷杂庚环)

(Phosphepane→1,2-Didehydroposphepane (3,4,5,6-tetrahydro-2H-phosphepine))



胆固醇→7,8-双脱氢胆固醇 (胆甾-5,7-二烯-3β-醇)

(Cholesterol→7,8-Didehydrocholesterol (Cholesta-5,7-dien-3β-ol))



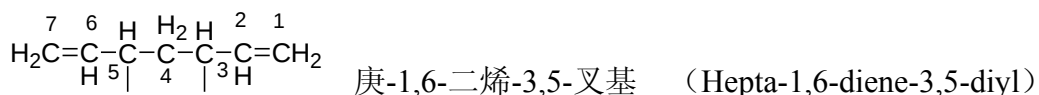
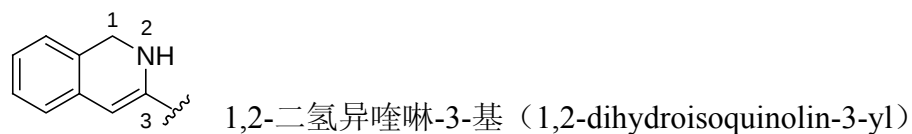
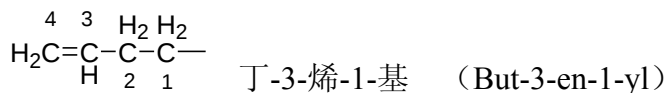
4.1.4. 饱和/去饱和后母体氢化物衍生的取代基命名

由饱和（氢化）或去饱和（脱氢）后母体氢化物衍生的取代基按 3.11 节规定进行

命名。

取代基上原子编号时游离价键所在位置应优于不饱和键的位置。由饱和母体氢化物衍生的取代基，其游离价键可在母体结构的任何位置，因此对非环不饱和结构中所有的游离价键位置，包括 1-位，均需在名称中标明。

例：



4.2. 特性基团 (Specification of characteristic groups)

4.2.1. 命名时的前缀和后缀

4.2.1.1. 特性基团

有机化合物命名时，结构中的特性基团是以在母体名称上加前、后缀来表明，它们的名称见下表。有关这些官能前、后缀的进一步应用，详见下一章。

表 4-1. 一些重要特性基团在取代操作法命名时作为前缀或后缀的用字

结构类别	结构式 ^[1]	作前缀时名称	作后缀时名称
酰卤 (Acid halides)	-CO-halogen -(C)O-halogen	卤羰基-(halocarbonyl)- —	甲酰卤 (-carbonyl halide) -酰卤 (-oyl halide)
醇负离子, 酚负离子 (Alcoholates, Phenolates)	-O ⁻	氧负(离子)基-(oxido-)	醇负离子, 酚负离子(-olate)
醇, 酚 (Alcohols, Phenols)	-OH	羟基-(hydroxy-)	醇, 酚 (-ol)
醛 (Aldehydes)	-CHO -(C)HO	甲酰基-(formyl)- 氧亚基-(oxo-)	-甲醛 (-carbaldehyde) -醛 (-al)
酰胺 (Amides)	-CO-NH ₂ -(C)O-NH ₂	氨基羰基- (carbamoyl)-	-甲酰胺 (-carboxamide) -酰胺 (-amide)

脒 (Amidines)	-C(=NH)-NH ₂ -(C)(=NH)-NH ₂	甲脒基- (carbamimidoyl-) —	-甲脒 (-carboximidamide) -脒 (-imidamide)
胺 (Amines)	-NH ₂	氨基- (amino-)	-胺 (-amine)
羧酸根 (Carboxylates)	-COO ⁻ -(C)OO ⁻	氧负(离子)羧基- (carboxylato-) —	-甲酸(根)负离子 (-carboxylate) -酸(根)负离子 (-oate)
羧酸 (Carboxylic acid)	-COOH -(C)OOH	羧基- (羧基-) (carboxy-) —	-甲酸 (-carboxylic acid) -酸 (-oic acid)
醚 (Ethers)	-OR ^[2]	(烃)氧基- ((R)-oxy-)	—
羧酸酯 (Esters (of carboxylic acids))	-COOR ^[2] -(C)OOR ^[2]	(烃)氧羰基- ((R)-oxycarbonyl-) —	-甲酸(烃)基酯 ((R) ...carboxylate) -酸(烃)基酯 ((R) ...oate)
卤代化合物 (Halides)	-X (-卤素, -halogen) (-F, -Cl, -Br, -I)	卤- (氟-, 氯-, 溴-, 碘-) halo- (fluoro-, chloro, bromo-, iodo-)	—
氢过氧化物 (Hydroperoxides)	-O-OH	过氧基- (hydroperoxy-)	—
亚胺 (Imines)	=NH =NR	氨基- (imino-) (烃) 氨基- ((R)- imino-)	-亚胺 (-imine)
酮 (Ketones)	>(C)=O	氧亚基- (oxo-)	-酮 (-one)
腈 (Nitriles)	-C≡N -(C)≡N	氰基- (cyano-) —	-(甲)腈 (-carbonitrile) -腈 (-nitrile)
硝基化合物 (Nitro compounds)	-NO ₂	硝基- (nitro-)	—
过氧化物 (Peroxides)	-O-OR	(烃)过氧基- ((R)-peroxy)	—
羧酸盐 (Salts (of carboxylic acids))	-COO ⁻ M ⁺ -(C)OO ⁻ M ⁺	— —	-甲酸(正离子) ((cation) ...carboxylate) -酸(正离子) ((cation) ...oate)
硫醚 (Sulfides)	-SR ^[2]	(烃)硫基- ((R)-sulfanyl-)	—
磺酸根 (Sulfonate)	-SO ₂ -O ⁻	磺酸(根)负离子- (sulfonato-)	-磺酸(根)负离子(-sulfonate)
磺酸 (Sulfonic acids)	-SO ₂ -OH	磺酸(基)- (sulfo-)	-磺酸 (-sulfonic acid)
亚磺酸 (Sulfinic acids)	-SO ₂ -OH	亚磺酸(基)- (sulfin-)	-亚磺酸 (-sulfinic acid)

硫醇负离子 (Thiolates)	-S ⁻	硫负(离子)基- (sulfido-)	硫负(离子) (-thiolate)
硫醇 (Thiols)	-SH	巯基- (sulfanyl-)	硫醇 (-thiol)

注：[1] (C)指该碳原子包括在母体氢化物的名称中，而不属于前缀或后缀所表达的基团。

[2] R 指母体氢化物（中文用烃代表）失去一氢后所形成的取代基。

4.2.1.2. 离子和自由基中心

母体结构中失去氢自由基或失去/加上氢正/负离子后，命名时需在前、后缀中作相应的表达。

母体结构中失去氢自由基者采用母体名称加后缀 ‘-(基)自由基’。

母体结构中失去氢负离子或加上氢正离子者采用母体名称加后缀 ‘-基正离子’ 或 ‘-正离子’，作为前缀尾时加 ‘-正离子(基)’。

母体结构中失去氢正离子或加上氢负离子者采用母体名称加后缀 ‘-基负离子’ 或 ‘-负离子’，作为前缀尾时加 ‘-负离子(基)’。

详细的规定和例子见 6.7 节。

4.2.2. 官能团的修饰基团

一些主要的特性基团或官能性母体化合物的衍生物，可以采用它们本来的名称后加此修饰基团的名称进行命名。

例：

CH₃-CH₂-CHO 丙醛 (Propanal)

→CH₃-CH₂-CH(OCH₃)₂ 丙醛二甲基缩醛 (Propanal dimethyl acetal)

→CH₃-CH₂-CH=NOH 丙醛肟 Propanal oxime

→CH₃-CH₂-CH=NNH₂ 丙醛腙 Propanal hydrazone

CH₃-CH₂-COOH 丙酸 (Propionic acid)

→CH₃-CH₂-COO-CH₃ 丙酸甲酯 (Propionic acid methyl ester) [注]

→CH₃-CH₂-CO-NH-NH₂ 丙(酸)酰肼 (Propionic acid hydrazide)

注：英文中也可采用更系统的命名 ‘methyl propionate’，但中文中对羧酸酯则仅此种命

名方式，此时也称‘丙酸甲酯’。

4.3. 官能性母体化合物和衍生的取代基（functional parent compounds and derived substituent group）

在用取代操作法命名时，一些虽然具有官能性特性的，但仍作为母体化合物对待的结构见下表。

表 4-2. 含氮和磷的官能性母体酸和衍生的取代基

母体酸 结构	名称	取代基	前缀
NH(O)(OH)_2	高氮酸 (Azonic acid)	$-\text{N(O)(OH)}_2$ $>\text{NH(O)}$	高氮酸基- (azono-) 二羟基亚硝基- (dihydroxynitroryl-) 氮亚硝叉基- (azonoyl-, hydronitroryl-)
$\text{NH}_2\text{(O)(OH)}$	氮酸 (Azinic acid)	$-\text{NH(O)(OH)}$ $-\text{NH}_2\text{(O)}$ $>\text{N(O)(OH)}$ $=\text{N(O)(OH)}$ $\begin{array}{c} \diagdown \\ \text{N(O)} \\ \diagup \end{array}$	氮羟基亚硝基- (hydrohydroxynitroryl-) 二氮亚硝基- (azinoyl-, dihydronitroryl-) 羟基亚硝叉基- (hydroxynitroryl-) 羟基亚硝亚基- 亚硝爪基-nitroryl-
PH(OH)_2	亚膦酸 (Phosphonous acid)	$-\text{P(OH)}_2$ $-\text{P(OH)O}^-$	亚膦酸基-, 二羟基亚膦基- (dihydroxyphosphanyl-) 羟基(氧负离子基)亚膦基- (hydroxyoxidophosphanyl-)
$\text{PH}_2\text{(OH)}$	次亚膦酸 (Phosphinous acid)	$-\text{PH(OH)}$ $>\text{P(OH)}$ $=\text{P(OH)}$ $-\text{P(OCH}_3)_2$ $-\text{PH(O}^-)$ [原文为 $>\text{P(O)(O}^-)$]	次亚膦酸基-, 氮羟基亚膦基- (hydroxyphosphanyl-) 羟基亚膦叉基- (hydroxyphosphanediyl-) 羟基亚膦亚基- (hydroxyphosphanylidene-) 二甲氧基亚膦基- (dimethoxyphosphanyl-) 氮(氧负离子基)亚膦基- (phosphinato-)

$\text{PH}(\text{O})(\text{OH})_2$	膦酸 (Phosphonic acid)	$-\text{P}(\text{O})(\text{OH})_2$ $>\text{PH}(\text{O})$ $-\text{P}(\text{O})(\text{O}^-)_2$ $-\text{P}(\text{O})(\text{OH})(\text{O}^-)$	膦酸基- (phosphono-) 二羟基膦酰基- (dihydroxyphosphoryl) 氢膦酰叉基- (phosphonoyl-, hydrophosphoryl-) 二氧负离子基膦酰基- (phosphonato-) 羟基(氧负离子基)膦酰基- (hydroxyoxidophosphoryl-)
$\text{PH}_2(\text{O})(\text{OH})$	次膦酸 Phosphinic acid	$-\text{PH}(\text{O})(\text{OH})$ $-\text{PH}_2(\text{O})$ $>\text{P}(\text{O})(\text{OH})$ $-\text{P}(\text{O})(\text{OH})(\text{OCH}_3)$ $\begin{array}{c} \diagup \\ \text{—P}(\text{O}) \\ \diagdown \end{array}$	次膦酸基-, 氢(羟基)膦酰基- (hydrohydroxyphosphoryl-) 二氢膦酰基- (phosphinoyl-dihydrophosphoryl-) 羟基膦酰叉基- (hydroxyphosphoryl-) 羟基(甲氧基)膦酰基- (hydroxymethoxyphosphoryl-) 膦酰爪基- (phosphoryl-)

砷和锑的官能性母体酸和衍生的取代基可按类似方式命名。

4.4. 官能团置换

结构中氧原子或羟基为其它原子或基团置换后,可在本来的特性基团、官能性母体化合物的名称或俗名中插入一定的前缀或连缀来命名。如硫置换氧后的特性基团‘-硫代磺酸’和‘-硫代羧酸’。类似地,氧原子为 $-\text{O}-\text{O}-$ 基团置换后,可在命名时加前缀‘过氧’或‘过’,如过(氧)羧酸。氧原子或羟基为硫属元素或含硫属元素基团置换时用连缀字‘代’,为其它原子或基团置换时则用连缀字‘替’来命名。官能团置换时用的前缀和连缀见表 4-3。

例:

$\text{CH}_3\text{-COOH}$ 乙酸 (Acetic acid)

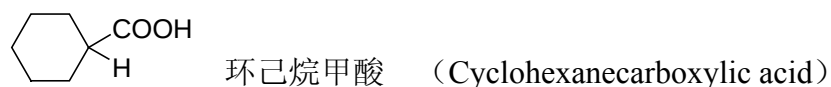
$\rightarrow \text{CH}_3\text{-CO-SH}$ 乙硫代-S-酸, 硫代乙-S-酸 (Thioacetic S-acid)

$\rightarrow \text{CH}_3\text{-CS-OH}$ 乙硫代-O-酸, 硫代乙-O-酸 (Thioacetic O-acid)

$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-COOH}$ 戊酸 (Pentanoic acid)

$\rightarrow \text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CO-SH}$ 戊硫代酸, 硫代戊酸 (Pentanethioic acid)

→ $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-C(=NH)-OH}$ 氨亚基替戊酸, 戊氨亚基替酸 (Pentaimidic acid)



$\text{C}_6\text{H}_5\text{-P(O)(OH)}_2$ 苯基膦酸 (Phenylphosphonic acid)

→ $\text{C}_6\text{H}_5\text{-P(O)(NH}_2\text{)(OH)}$ *P*-苯基氨基替膦酸 (*P*-Phenylphosphonamidic acid)

→ $\text{C}_6\text{H}_5\text{-P(O)Cl(OH)}$ 苯基氯替膦酸 (Phenylphosphonochloridic acid)

→ $\text{C}_6\text{H}_5\text{-P(O)(OH)(NHNH}_2\text{)}$ *P*-苯基肼基替膦酸 (*P*-Phenylphosphonohydrazidic acid)

→ $\text{C}_6\text{H}_5\text{-P(S)(NH-CH}_3\text{)(OH)}$ *N*-甲基-*P*-苯基(氨基替)硫代膦-*O*-酸

(*N*-Methyl-*P*-phenylphosphonamidothioic *O*-acid)

表 4-3. 官能团置换后命名用前缀和连缀

被置换原子 (基团)	置换成原子 (基团)	采用前缀	采用连缀 ^[3]
-OH	-NH ₂	氨基替- (Amido-)	-氨基替- (-amido-)
-OH	-N ₃	叠氮替- (Azido-)	-叠氮替- (-azido-)
-OH	-Br	溴替- (Bromo-)	-溴替- (-bromido-)
-OH	-Cl	氯替- (Chloro-)	-氯替- (-chlorido-)
-OH	-OCN	氰氧基替- (Cyanato-)	-氰氧基替- (-cyanatido-)
-OH	-CN	氰基替- (Cyano-)	-氰基替- (-cyanido-)
-O-	-S-S-	过硫代- (Dithioperoxo-) ^[1]	-过硫代- (-dithioperoxo-) ^[1,2]
-OH	-F	氟替- (Fluoro-)	-氟替- (-fluorido-)
-OH	-I	碘替- (Iodo-)	-碘替- (-iodido-)
-OH	-NCO	异氰氧基替- (Isocyanato-)	-异氰氧基替- (-isocyanatido-)

-OH	-NC	异氰基替- (Isocyno-)	-异氰基替- (-isocyanido-)
=O + -OH	$\equiv\text{N}$ / -N< / =N-	氮替- (Nitrido-)	-氮替- (-nitrido-)
-OH	-SCN	氰硫基代- (Thiocynato-) ^[1]	-氰硫基代- (-thiocyanatido-) ^[1,2]
-OH	-NCS	异氰硫基代- (Isothiocynato-) ^[1]	-异氰硫基代- (-isothiocyanatido-) ^[1,2]
=O	=NH	氨亚基替- (Imido-)	-氨亚基替- (-imido-)
-OH	-NH-NH ₂	肼基替- (Hydrazido-)	-肼基替- (-hydrazido-)
-O-	-O-O-	过氧- (Peroxy-)	-过氧- (-peroxo-)
=O + -OH	=Se / -Se-	硒代- (Seleno-)	-硒代- (-seleno-)
=O + -OH	=Te / -Te-	碲代- (Telluro-)	-碲代- (-telluro-)
=O + -OH	=S / -S-	硫代- (Thio-)	-硫代- (-thio-)
-O-	-OS-/ -SO-	硫氧代- (Thioperoxy-) ^[1]	-硫氧代- (-thioperoxo-) ^[1,2]

注 [1] 硒、碲类似物可采用相应的硒代、碲代。

[2] 如在命名中此类连缀可能发生歧义时则可加括号予以标明。

[3] 英文中此类连缀的最后字母 ‘o’ 如在 ‘a’, ‘i’, ‘o’ 前时通常省略。

第 5 章 命名实施导引 (Guide to name construction)

本章以下是化合物名称构词的基本原则。

5.1. 命名通则

有机化合物的系统名称的构建按下步骤依次进行。

(1) 根据化合物的结构本质确定命名的操作方法 (参见 2.2 节), 虽然本建议中主要采用称作取代命名法的方法, 但其它的命名法, 如官能团类别命名法 (参见 1.4.3.3.2 节), 置换命名法 (参见 1.4.3.3.6 节), 多重命名法 (参见 1.4.3.3.10 节) 也常替代采用。

(2) 确定用作后缀的特性基团, 或者官能团类名的名称。只能选一种特性基团 (称主基团) 用作后缀, 或者一种官能团类别。其它取代基的名称则均置于前缀中。

(3) 确定用作词根的母体氢化物, 包括一些相应的前缀。

(4) 命名母体氢化物和主特性基团, 或官能性母体化合物。

(5) 确定连缀和/或前缀 (包括复数字前缀), 以及尽可能对结构进行编号。

(6) 命名可分开的取代基前缀和有必要时进行结构的完整编号。

(7) 将化合物中各结构单元复合成一完整的名称。各取代基的名称在中国化学会 1980 年版命名原则中系按其立体化学顺序规则中的大小在前缀中由小至大依次排列, 但在 IUPAC 英文命名时则采用各取代基的名称按其英文字母顺序在前缀中依次排列。由于取代基的大小有时难以确定, 本次修订建议采用 IUPAC 的按其英文字母顺序的排列次序。

(8) 加上表示结构中有与标准价键数不同的, 同位素丰度改变的标识, 以及表示结构中相应的立体化学词头。

在取代操作命名法中, 一些特性基团名称既可作前缀, 也可作后缀 (见 4.2.1.1 节), 但另一些则只能用作前缀或在官能团类别命名法中作类名 (见下表)。官能团类别命名法中, 官能团类名为词根, 其余结构单元的 ‘基’ 名为前缀。

表 5-1. 取代操作命名法中只能用作前缀的特性基团

特性基团	作前缀时名称	作类名 ^[1]
-Br	溴- (Bromo-)	溴(化物) (bromide)

-BrO	亚溴酰基- (Bromosyl-)	—
-BrO ₂	溴酰基- (Bromyl-)	—
-Cl	氯- (Chloro-)	氯(化物) (chloride)
-ClO	亚氯酰基- (Chlorosyl-)	—
-ClO ₂	氯酰基- (Chloryl-)	—
-ClO ₃	高氯酰基- (Perchloryl-)	—
-F	氟- (Fluoro-)	氟(化物) (fluoride)
-I	碘- (Iodo-)	碘(化物) (iodide)
-IO	亚碘酰基- (Iodosyl-)	—
-IO ₂	碘酰基- (Iodyl-)	—
-IO ₃	高碘酰基- (Periodyl-)	—
-I(OH) ₂	二羟-λ ³ -碘基- (Dihydroxy-λ ³ -iodanyl-)	—
-IX ₂ ^[2]	二卤-λ ³ -碘基- (Dihalo-λ ³ -iodanyl-)	—
=N ₂	重氮- (Diazo-)	—
-N ₃	叠氮- (Azido-)	叠氮(化物) (azide)
-NO	亚硝基- (Nitroso-)	—
-NO ₂	硝基- (Nitro-)	—
-OR ^[3]	烃氧基- ((R)-oxy-)	—
-NC	异氰基- (Isocyano-)	异氰(化物) (isocyanide)
-NCO	异氰氧基- (Isocyanato-)	异氰酸酯(盐) (isocyanate)
-NCS	异氰硫基- (Isothiocynato-)	异硫氰酸酯(盐) (isothiocyanate)
-OCN	氰氧基- (Cyanato-)	氰酸酯(盐) (cyanate)
-SCN	氰硫基- (Thiocynato-)	硫氰酸酯(盐) (thiocyanate)
-SR ^[3]	烃硫基- ((R)-sulfanyl-)	—
-SeR ^[3]	烃硒基- ((R)-selanyl-)	—
-TeR ^[3]	烃碲基- ((R)-tellanyl-)	—
-SH ₃	λ ⁴ -甲硫烷基- (λ ⁴ -Sulfanyl-)	—

-S(O)-R	烃亚磺酰基- (alkanesulfinyl-)	—
-S(O ₂)-R	烃磺酰基- (alkanesulfonyl-)	—

注 [1] 在官能团类别命名法中可作为类名，但可作类名的特性基团并不仅限于此表。

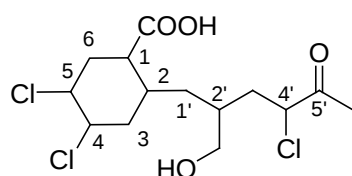
[2] X 表示卤素原子。

[3] R 表示烃基，母体氢化物失去一氢原子后形成的取代基。

5.2. 命名时用作后缀特性基团（主体基团）的确定

所命名的化合物中如含多个特性基团（上表中不能作后缀者除外）时，只能选择一个特性基团作为后缀，此基团称作主体基团。主体基团的选择按该基团类型在下表中的次序确定，次序最高者为主（表中位前者）。

例：



4,5-二氯-2-[4-氯-2-(羟甲基)-5-氧亚基己基]环己烷-1-甲酸

(4,5-Dichloro-2-[4-chloro-2-(hydroxymethyl)-5-oxohexyl]cyclohexane-1-carboxylic acid)

（分子中三个可作后缀的特性基团羟基、酮基和羧基中羧基最优先。）

表 5-2. 特性基团类型的高位（优先）次序（按递减方式排列）

序列	按特性基团分类的化合物类型	General classes of compounds
1	自由基	Radicals
2	负离子	Anions
3	正离子	Cations
4	两性离子化合物	Zwitterionic compounds
5	羧酸（依次为 COOH, C(O)O ₂ H, 然后为它们的 S 和 Se 衍生物，依次为磺酸、亚磺酸，硒酸等，以及膦酸，胂酸等）	Acids (in the order COOH, C(O)O ₂ H, then their S and Se derivatives followed by sulfonic, sulfinic, selenonic, etc., phosphonic, arsonic, etc., acids)
6	酸酐	Anhydrides
7	酯	Esters

8	酰卤	Acid halides
9	酰胺	Amides
10	酰肼	Hydrazides
11	二酰亚胺	Imides
12	腈	nitriles
13	醛以及依次为硫代醛，硒代醛和碲代醛	Aldehydes followed by thioaldehydes, selenoaldehydes, and telluroaldehydes
14	酮以及依次为硫代酮，硒代酮和碲代酮	Ketones followed by thioketones, selenoketones, and telluroketones
15	醇和酚以及依次为硫醇，硒醇和碲醇	Alcohols and phenols followed by thiols, selenols, and tellurols
16	氢过氧化物以及依次为硫代氢过氧化物，硒代氢过氧化物和碲代氢过氧化物	Hydroperoxides followed by thiohydroperoxides, selenohydroperoxides, and tellurohydroperoxides
17	胺	Amines
18	亚胺	Imines
19	肼（联氨），磷烷（联磷）等	Hydrazines, phosphanes, etc.
20	醚以及硫醚，硒醚和碲醚	Ethers followed by sulfides, selenides, and tellurides
21	过氧化物以及依次为过硫化物，过硒化物和过碲化物	Peroxides followed by disulfides, diselenides, and ditellurides

5.3. 命名时用作词根的母体氢化物的确定

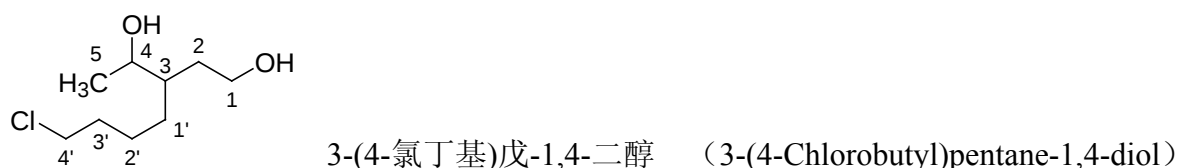
主体基团确定后的下一步即为依据结构状况确定用作词根的母体氢化物。

5.3.1. 无环化合物中母体氢化物（主链）的确定

无环化合物中母体氢化物（主链）可按下列标准，自上至下逐条对照至确定为止。

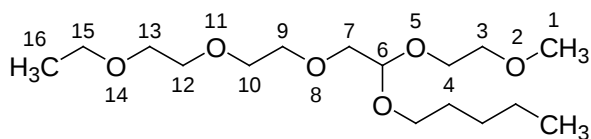
（1）链中含有最多个数的最高位（优先）的特性基团。

例：



(2) 链中含有最多个数的杂原子(以置换法‘杂’连缀字命名的含杂原子链)。

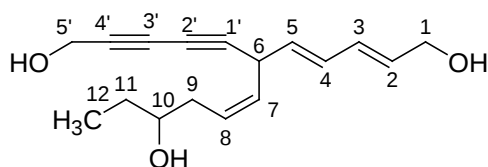
例:



6-(戊氧基)-2,5,8,11,14-五氧杂十六烷
(6-(pentyloxy)-2,5,8,11,14-pentaoxahexadecane)

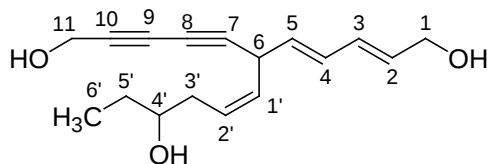
(3) 最长的链。按 IUPAC-2013 的建议, 选择主链时优先考虑链的链长(链骨架原子数), 其次再考虑链中所含重键的数量。此选择标准与 IUPAC-1979 的建议相反。

例:



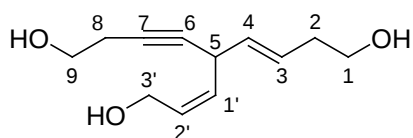
6-(5-羟基戊-1,3--二炔基)十二碳-2,4,7-三烯-1,10-二醇
(6-(5-hydroxypenta-1,3-dienyl)dodeca-2,4,7-triene-1,10-diol)

如按 IUPAC-1979 的建议则命名为:



6-(4-羟基己-1-烯基)十一碳-2,4-二烯-7,9-二炔-1,11-二醇
(6-(4-Hydroxyhex-1-enyl)undeca-2,4-diene-7,9-diyne-1,11-diol)

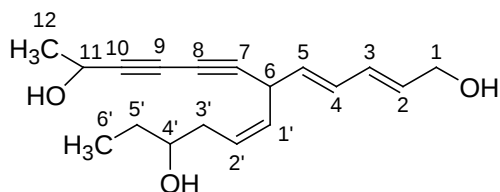
例:



5-(3-羟基丙-1-烯基)壬-3-烯-6-炔-1,9-二醇
(5-(3-Hydroxyprop-1-enyl)-3-nonen-6-yne-1,9-diol)

(4) 汇集最多数量重键的链。

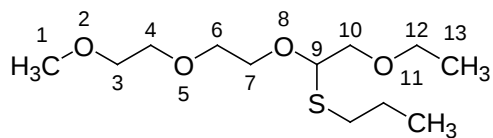
例:



6-(4-羟基己-1-烯基)十二碳-2,4-二烯-7,9-二炔-1,11-二醇
(6-(4-Hydroxylhex-1-enyl)dodeca-2,4-diene-7,9-diyne-1,11-diol)

(5) 杂原子链时，其中含最高位杂原子（参见 3.3.3.1 节，表 3-3）最多的链。

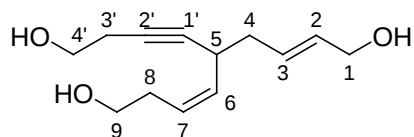
例：



9-(丙硫基)-2,5,8,11-四氧杂十三烷
(9-(propylsulfanyl)-2,5,8,11-tetraoxatridecane)

(6) 最多双键的链。

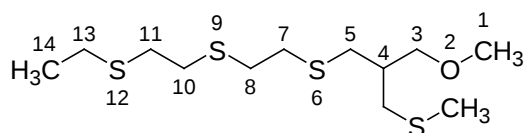
例：



5-(4-羟基丁-1-炔基)壬-2,6-二烯-1,9-二醇
(5-(4-Hydroxybut-1-ynyl)-2,6-nonadiene-1,9-diol)

(7) 杂原子链时，其中由所有杂原子构成的数字位次组最低的链。如相同时，然后再按它们（杂原子）的高位情况进行选择。

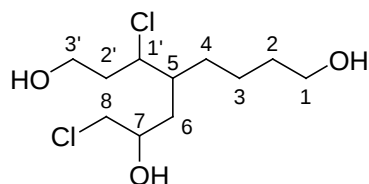
例：



4-[(甲硫基)甲基]-2-氧杂-6,9,12-三硫杂十四烷
(4-[(methylsulfanyl)methyl]-2-oxa-6,9,12-trithiatetradecane)

(8) 作为后缀的主特性基团位次或位次组最低的链。

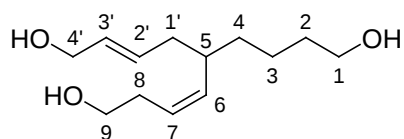
例：



8-氯-5-(1-氯-3-羟基丙基)辛-1,7-二醇
(8-Chloro-5-(1-chloro-3-hydroxypropyl)octane-1,7-diol)

(9) 所有重键构成的数字位次组最低的链。

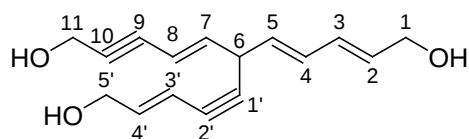
例：



5-(4-羟基丁-2-烯基)壬-2,6-二烯-1,9-二醇
(5-(4-Hydroxy-2-butenyl)nona-2,6-diene-1,9-diol)

(10) 双键位次组最低的链。

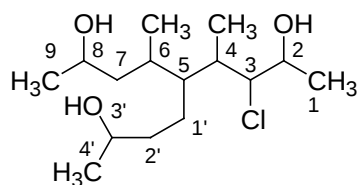
例：



6-(5-羟基戊-3-烯-1-炔基)十一碳-2,4,7-三烯-9-炔 1,11-二醇
(6-(5-Hydroxy-3-penten-1-ynyl)undeca-2,4,7-trien-9-yne-1,11-diol)

(11) 置于前缀中取代基数目最多的链。

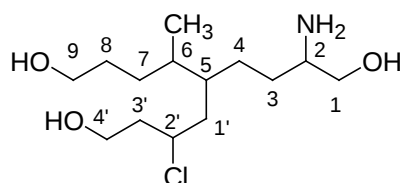
例：



3-氯-5-(3-羟基丁基)-4,6-甲基壬-2,8-二醇
(3-Chloro-5-(3-hydroxybutyl)-4,6-dimethylnonane-2,8-diol)

(12) 所有前缀取代基的数字位次组最低的链。

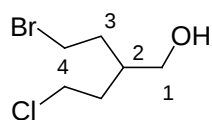
例：



2-氨基-5-(2-氯-4-羟基丁基)-6-甲基壬-1,9-二醇
(2-Amino-5-(2-chloro-4-hydroxybutyl)-6-methylnonane-1,9-diol)

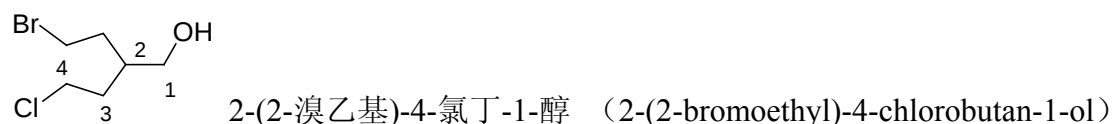
(13) 按英文字母排列在前的前缀取代基的链。

例：

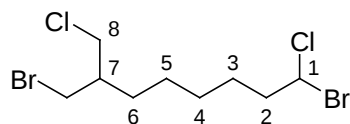


4-溴-2-(2-氯乙基)丁-1-醇 (4-bromo-2-(2-chloroethyl)butan-1-ol)

注意：不是下列命名，因溴先于溴乙基。

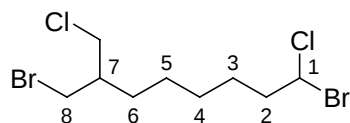


例：



1-溴-7-(溴甲基)-1,8-二氯辛烷 (1-bromo-7-(bromomethyl)-1,8-dichlorooctane)

注意：不是下列命名，因溴-溴甲基 (bromo-bromomethyl) 优先于溴-氯 (bromo-chloro)。



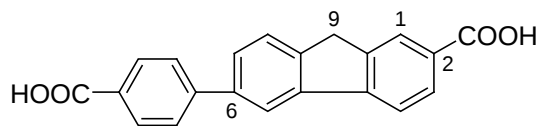
1,8-二溴-1-氯-7-(氯甲基)辛烷 (1,8-Dibromo-1-chloro-7-(chloromethyl)octane)

5.3.2. 环系化合物中命名时用作词根母体氢化物（主环系）的确定

当命名化合物中含有二个或二个以上环或环系时，需选择其中之一为主环系，以其名称作为命名的词根，选择按下列标准，自上至下逐条对照至确定为止。

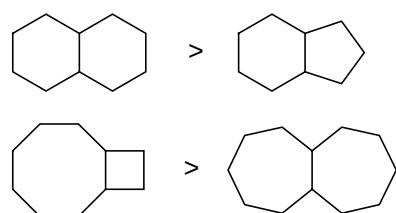
- (1) 环中含有最多个数的最高位（优先）的，作为命名时后缀的特性基团。
- (2) 杂环优于所有碳环。
- (3) 杂环中选择高位的环（参见第三章附表二 并环法命名用基本杂环）为主环。
- (4) 芳碳环（焯环环系(mancude-ring system)）优于脂碳环。
- (5) 芳碳环中选择高位的环（参见第三章附表一 并环法命名用基本碳环）为主环。

例：

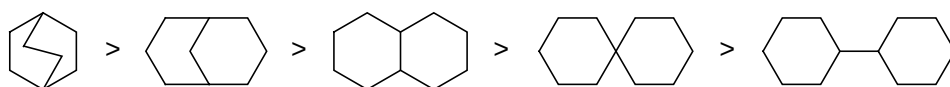


6-(4-羧基苯基)茚-2-甲酸 (6-(4-carboxyphenyl)fluorine-2-carboxylic acid) (茚高于苯)

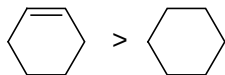
- (6) 脂碳环中环数目多的环系为主环系。
- (7) 环系中有环大者为主环系。



(8) 环系中二或更多环间共有原子最多者为主环系。

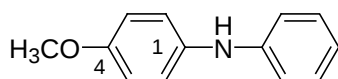


(9) 氢化程度低的环为主环。



(10) 环或环系上作为前缀的取代基数目多者为主。

例：

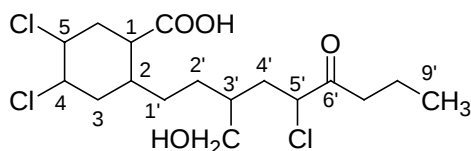


4-甲氧基-*N*-苯基苯胺 (4-methoxy-*N*-phenylaniline)

5.3.3. 环-链化合物中命名时用作词根母体氢化物的确定

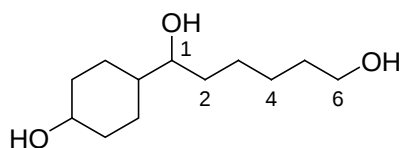
当命名化合物中既有环又有链时，以带有最高位（优先）特性基团的环或链作为母体氢化物，而不论环的大小和链的长短。当有多个最高位（优先）的特性基团时，以带特性基团多的环或链为母体氢化物；如此基团数相同时，则再比较它们取代程度的大小或所含原子数的多少。IUPAC-2013 首选名建议中则不考虑所含原子数的多少，环总是优先于链，对此本建议暂不采用。

例：



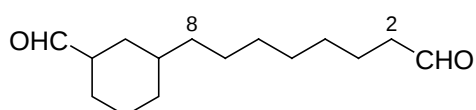
4,5-二氯-2-[5-氯-3-(羟甲基)-6-氧亚基壬基]环己烷-1-甲酸

(4,5-Dichloro-2-[5-chloro-3-(hydroxymethyl)-6-oxononyl]cyclohexane-1-carboxylic acid)



1-(4-羟基环己基)己-1,6-二醇

(1-(4-hydroxycyclohexyl)hexane-1,6-diol) (链上有较多特性基团)



8-(3-甲酰基环己基)辛醛 (8-(3-formylcyclohexyl)octanal) (链上所含原子数多于环上原

子数)

5.4. 命名化合物中原子和基团位次的编号

5.4.1. 化合物命名中位次编号插入的位置

化合物命名中原子和基团位次的标明，一律采用位次数字插入代表它们的名称之前，这是与以前规定有所不同之处。英文命名中仍保留部份特例，但中文中不作保留。

例：

己-2-烯 (原称 2-己烯) (Hex-2-ene (原称 2-Hexene))

环己-2-烯-1-醇 (原称 2-环己烯-1-醇) (Cyclohex-2-en-1-ol (原称 2-Cyclohexen-1-ol))

萘-2-基 (原称 2-萘基) (2-Naphthyl (Naphthalen-2-yl 的缩写) (不能写成 Naphth-2-yl))

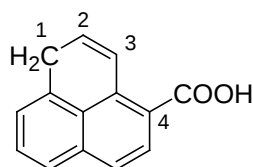
吡啶-2-基 (原称 2-吡啶基) (2-Pyridyl (Pyridin-2-yl 的缩写) (不能写成 Pyrid-2-yl))

5.4.2. 化合物母体结构的编号

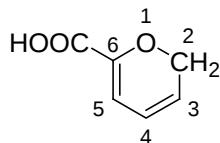
第三章中对各类母体氢化物的编号已作规定，对于连接上各种特性基团后的化合物，其已确定的编号方式不变，杂环中由杂原子决定的编号方式也不变，但在编号的起点和方向上当有不同选择时，则按下列标准，自上至下逐条对照至确定为止。

(1) 额外氢标明的位次最低 (小)。

例：



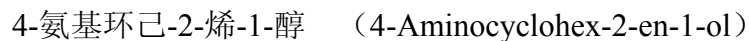
1H-苊-4-甲酸 (1H-Phenalene-4-carboxylic acid)



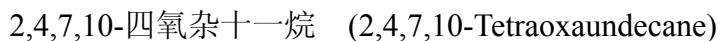
2H-吡喃-6-甲酸 (2H-Pyran-6-carboxylic acid)

(2) 作为命名后缀的主体基团位次最低 (小)。

例：



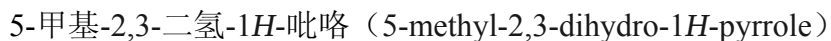
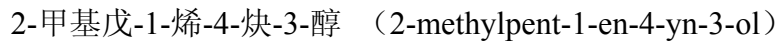
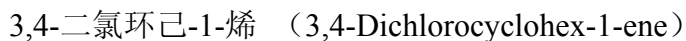
例：



而不是 2,5,8,10-四氧杂十一烷 (2,5,8,10-Tetraoxaundecane)

以氢化和脱氢前缀命名时，它们的位次（组）最低（小）。

例：



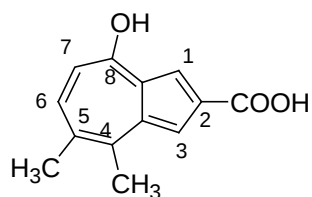
例：



5,6-二氯-1,2,3,4-四氢萘

(5,6-Dichloro-1,2,3,4-tetrahydronaphthalene)

而非 7,8-二氯-1,2,3,4-四氢萘 (1,2,3,4,5,6 低于 1,2,3,4,7,8)



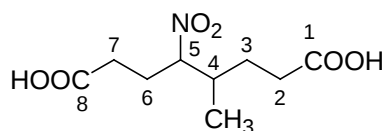
8-羟基-4,5-二甲基萸-2-甲酸

(8-Hydroxy-4,5-dimethylazulene-2-carboxylic acid)

而非 4-羟基-7,8-二甲基萸-2-甲酸 (4,5,8 低于 4,7,8)

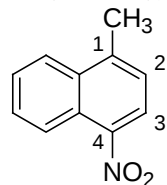
(6) 前缀中排列在前的取代基的位次最低 (小)。

例:



4-甲基-5-硝基辛二酸 (4-Methyl-5-nitrooctanedioic acid)

而非 4-硝基-5-甲基辛二酸 (4-Nitro-5-methyloctanedioic acid)

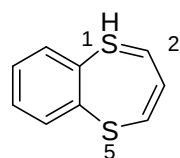


1-甲基-4-硝基萘 (1-Methyl-4-nitronaphthalene)

而非 4-甲基-1-硝基萘 (4-Methyl-1-nitronaphthalene)

(7) 不同价态的相同原子中, 非标准价态原子的位次最低 (小)。

例:



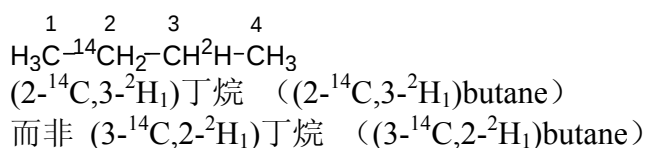
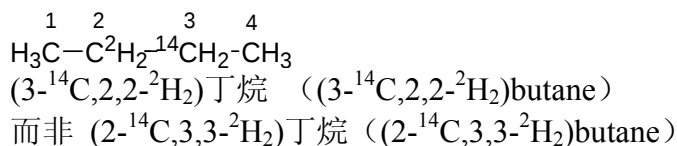
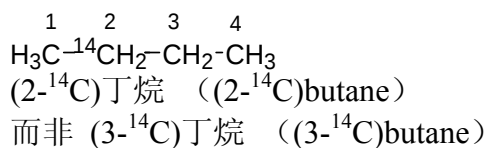
1λ⁴,5-苯并二噻庚环 (1λ⁴,5-benzodithiepine)

而非 1,5λ⁴-苯并二噻庚环 (1,5λ⁴-benzodithiepine)

(8) 同位素丰度改变化合物中, 选择丰度改变原子位次最低 (小) 的编号; 如有多个丰度改变原子存在时, 则按位次组最低的方式编号; 如还需选择时, 则按高原子序数或

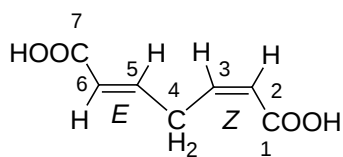
同一元素时的高质量数核的位次最低编号。

例：

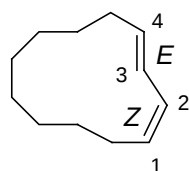


(9) 如需在一对立体异构源中心间选择时，将低的编号给予 CIP 立体词头中的 *Z*, *R*, *Ra*, *Rp*, *M* 和 *r* 或非 CIP 立体词头中的 *cis*, *r*, *c* (参见第七章)。

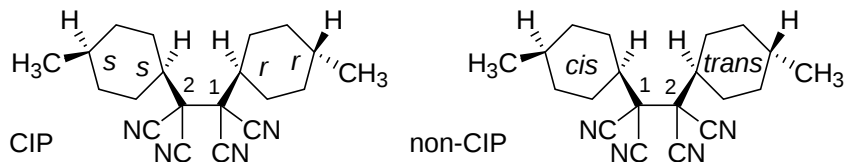
例：



(2*Z*,5*E*)-庚-2,5-二烯二酸 ((2*Z*,5*E*)-hepta-2,5-dienedioic acid)
而非 (2*E*,5*Z*)-庚-2,5-二烯二酸 ((2*E*,5*Z*)-hepta-2,5-dienedioic acid)

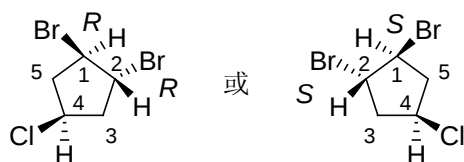


(1*Z*,3*E*)-环十二碳-1,3-二烯 ((1*Z*,3*E*)-cyclododeca-1,3-diene)
而非 (1*E*,3*Z*)-环十二碳-1,3-二烯 ((1*E*,3*Z*)-cyclododeca-1,3-diene)



CIP 立体词头命名： 1-[(1*r*4*r*)-4-甲基环己基]-2-[(1*s*,4*s*)-4-甲基环己基]乙-1,1,2,2-四腈
(1-[(1*r*4*r*)-4-methylcyclohexyl]-2-[(1*s*,4*s*)-4-methylcyclohexyl]ethane-1,1,2,2-tetracarbonitrile)

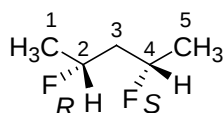
非 CIP 立体词头命名： 1-(*cis*-4-甲基环己基)-2-(*trans*-4-甲基环己基)乙-1,1,2,2-四腈
(1-(*cis*-4-methylcyclohexyl)-2-(*trans*-4-methylcyclohexyl)ethane-1,1,2,2-tetracarbonitrile)



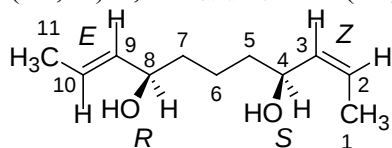
CIP 立体词头命名: *rel*-(1*R*,2*R*)-1,2-二溴-4-氯环戊烷

(*rel*-(1*R*,2*R*)-1,2-dibromo-4-chlorocyclopentane)

非 CIP 立体词头命名: 1*r*,2*t*-二溴-4-*c*-氯环戊烷 (1*r*,2*t*-dibromo-4-*c*-chlorocyclopentane)



(2*R*,4*S*)-2,4-二氟戊烷 ((2*R*,4*S*)-2,4-difluoropentane)



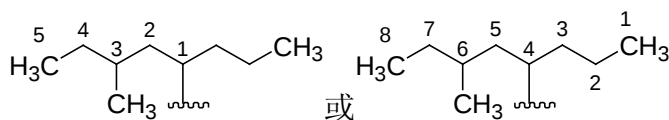
(2*Z*,4*S*,8*R*,9*E*)-十一碳-2,9-二烯-4,8-二醇 ((2*Z*,4*S*,8*R*,9*E*)-undeca-2,9-diene-4,8-diol)

(比较 2-位给'Z'还是给'E')

5.4.3. 化合物母体结构上取代基的编号[注]

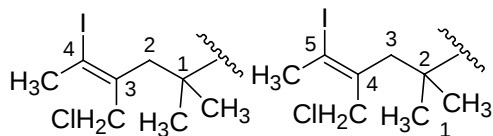
链状取代基编号时通常总是将连接点(带游离价键)编为 1 位,但也有按取代基的主链进行编号,并使连接点(带游离价键)的位次编成尽可能的低;环取代基则将其中的额外氢标明,然后是连接点(带游离价键)的位次编成尽可能的低,如仍需选择时则可参考上节(5.4.2)中(4)、(5)条标准。

例:



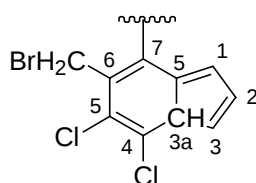
3-甲基-1-丙基戊基 (3-Methyl-1-propylpentyl) 或

6-甲基辛-4-基 (6-Methyloctan-4-yl)

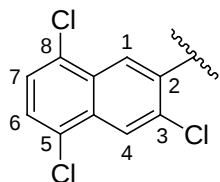


3-氯甲基-4-碘-1,1-二甲基戊-3-烯基 (3-Chloromethyl-4-iodo-1,1-dimethylpent-3-enyl) 或

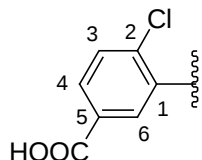
4-氯甲基-5-碘-2-甲基己-4-烯-2-基 (4-Chloromethyl-5-iodo-2-methylhex-4-en-2-yl)



6-溴甲基-4,5-二氯-3aH-茛-7-基
(6-Bromomethyl-4,5-dichloro-3aH-inden-7-yl)



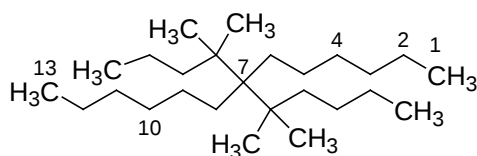
3,5,8-三氯萘-2-基
(3,5,8-Trichloro-2-naphthyl)



5-羧基-2-氯苯基
(5-Carboxy-2-chlorophenyl)
而非 3-羧基-6-氯苯基 (2,5 低于 3,6)

[注] 《有机化学命名原则》(1980) 规定在化合物命名时取代基全名可放在括号中，但也可不用括号，而将取代基中的编号数字加撇。现建议摒弃后一表示形式。

例：



7-(1,1-二甲基丁基)-7-(1,1-二甲基戊基)十三烷
(7-(1,1-Dimethylbutyl)-7-(1,1-dimethylpentyl)tridecane)
不采用加撇的命名形式
7-1',1'-二甲基丁基-7-1'',1''-二甲基戊基)十三烷
(7-1',1'-Dimethylbutyl-7-1'',1''-dimethylpentyltridecane)

5.5. 命名化合物中前缀排列顺序

有机化合物命名中通常有两种类型的前缀：不可分开的和可分开的前缀。此类区分源自有机化合物名称编制索引时的考虑，系统命名中表示取代基的前缀，在编制索引时有一方式是将它们分开置于母体结构名称之后，中间加逗号，如 2-氯-3-甲基萘

(2-chloro-3-methylnaphthalene) 在索引中则成：萘，2-氯-3-甲基- (naphthalene, 2-chloro-3-methyl-)，因此氯和甲基即称为可分开前缀。

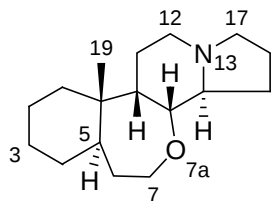
进行系统命名时，不可分开的前缀 (non-detachable prefixes) 紧接排列在其修饰的母体结构名称之前，而可分开的前缀 (detachable prefixes) 则再在这之前。

5.5.1. 不可分开前缀的排列顺序

不可分开的前缀又可分成两种类型，一种是标明母体氢化物骨架结构修饰的前缀，包括环结构状态的前缀：环 (cyclo)，双环 (bicyclo)，螺 (spiro)，断(环) (seco)，增 (homo)，脱 (nor) 等；并环时的拼合体环名如：苯并 (benzo)，辛环并 (cycloocta)，咪唑并 (imidazo) 等；成桥时的桥名前缀如：乙烯桥 (etheno)，苯桥 (benzeno) 等以及表示骨架异构化状态的前缀如：异 (iso)，仲 (sec)，叔 (tert) 等。另一种是母体氢化物骨架结构置换命名时的置换原子构成的前缀，主要是置换原子名加‘杂’的前缀，如氧杂 (oxa)，磷杂 (phospha) 等。

有多个骨架结构修饰的不可分开前缀存在时，各前缀按他们的英文名称顺序依次排列；有多个骨架结构置换原子时的前缀则按他们的位次依次排列；当此两种前缀均存在时则先排列骨架结构置换原子的前缀。

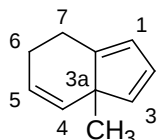
例：



7a-氧杂-13-氮杂-7a-增-18-降-5 α -雄甾烷 (7a-oxa-13-aza-7a-homo-18-nor-5 α -androstane)

标注慢环额外氢(indicated hydrogen)的标记‘H’可看作是一种特殊的不可分开前缀，它排列于不可分开前缀之前，可分开前缀之后。

例：



3a-甲基-6,7-二脱氢-3aH-茚 (3a-Methyl-6,7-didehydro-3aH-indene)

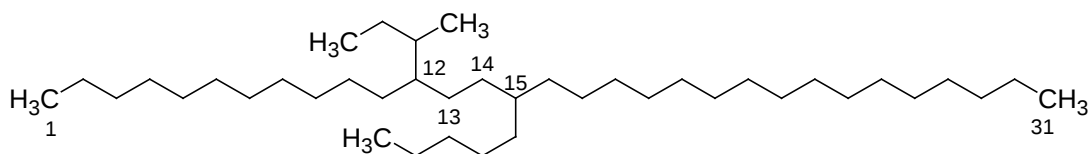
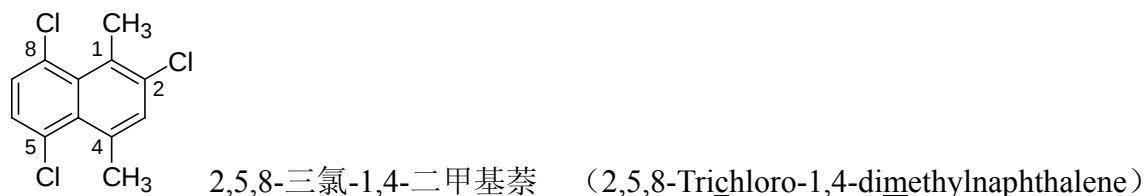
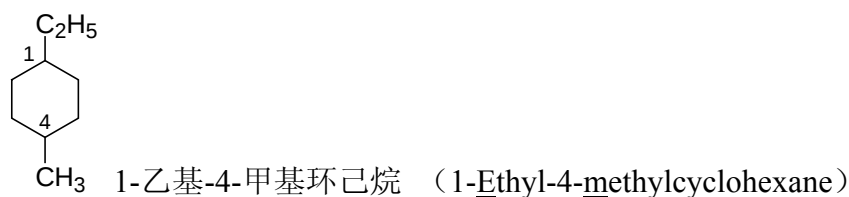
5.5.2. 可分开前缀的排列顺序

可分开前缀主要是各种原子和取代基的名称，前已提到在中国化学会 1980 年版命

名原则中各取代基的名称系按其立体化学顺序规则中的大小在前缀中由小至大依次排列，但在 IUPAC 英文命名时则采用各取代基的名称按其英文字母顺序在前缀中依次排列，因此也称作按字母顺序排列的可分开前缀（**alphabetized detachable prefix**）。由于取代基的大小有时难以确定，而且这一排列顺序还涉及其他方面的命名，为此本次修订建议还是采用 IUPAC 的按其英文字母顺序的排列次序。不同情况下的排列次序规定如下：

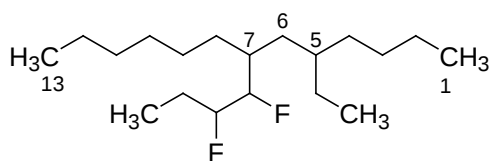
（1）表示原子和未进一步取代的取代基等的简单前缀可按其英文字母的顺序依次排列，表示它们个数的复数字头不计入字母顺序。

例：



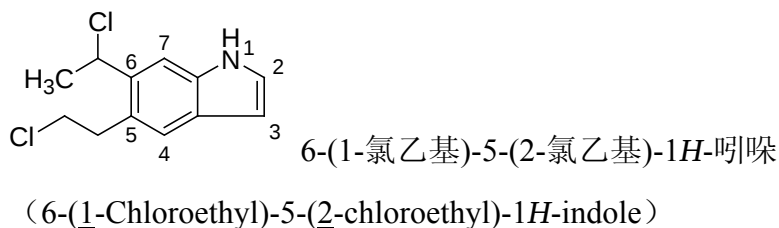
（2）有进一步取代的取代基则比较它们的完整名称。

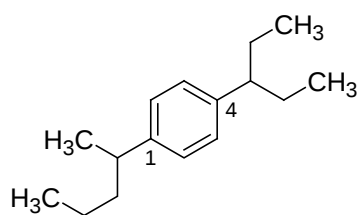
例：



（3）当二个取代基名称相同，但其中数字位次不同，则按此数字小大前后排列。

例：



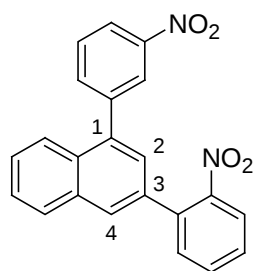


1-(戊-2-基)-4-(戊-3-基)苯

(1-(Pentan-2-yl)-4-(pentan-3-yl)benzene)

(4) 当二个取代基名称相同，但其中邻、间、对 (*o*-, *m*-, *p*-) 位次不同，则按此顺序前后排列。

例：

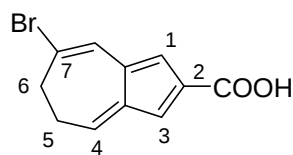


3-(*o*-硝基苯基)-1-(*m*-硝基苯基)萘

(3-(*o*-Nitrophenyl)-1-(*m*-nitrophenyl)naphthalene)

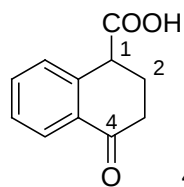
表示有机化合物氢化程度的前缀‘氢化 (hydro)’ ‘脱氢 (dehydro)’ 现也看作是分开的前缀，在决定位次编号时应优先考虑给予低位次的编号，但它有别于上述按字母排列顺序的前缀，因此规定它们排列于可分开前缀与不可分开前缀之间，如此二同时存在时，‘脱氢’在前。‘脱水’前缀也可作类似安排。

例：



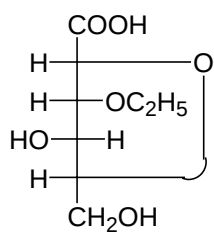
7-溴-5,6-二氢莨-2-甲酸

(7-bromo-5,6-dihydroazulene-2-carboxylic acid)



4-氧亚基-1,2,3,4-四氢萘甲酸

(4-Oxo-1,2,3,4-tetrahydronaphthalene-carboxylic acid)

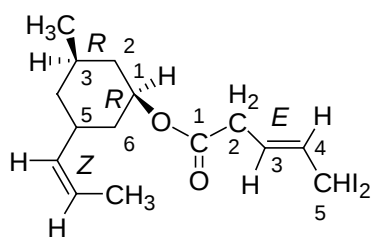


3-O-乙基-2,5-脱水-D-古洛糖酸 (3-O-Ethyl-2,5-anhydro-D-gulonic acid)

5.5.3. 立体词头的排列顺序

标志结构中立体化学的立体词头按其位次大小依次排列在命名结构名称的最前，外加括号。如结构中有各自独立的编号系统子结构，则分别放在各子结构的名称之前。

例：



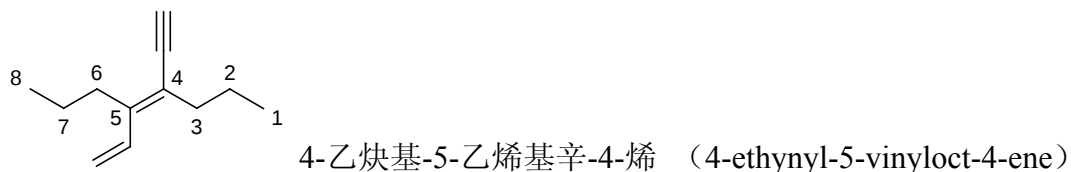
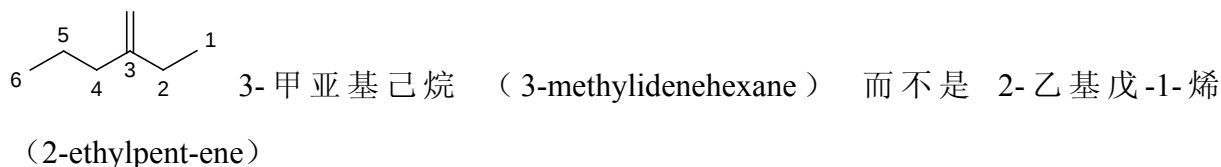
(3E)-5,5-二碘戊-3-烯酸 (1R,3R)-3-甲基-5-((1Z)-丙-1-烯-1-基)环己烷酯
((1R,3R)-3-Methyl-5-((1Z)-prop-1-en-1-yl)cyclohexyl (3E)-5,5-diiodopent-3-enoate)

第 6 章 各类化合物的命名

本章为前述的有机化合物一般命名规则在各类具体化合物中的应用。

不带特性基团（除重键外）的碳氢化合物的命名原则已在第三章母体氢化物，第四章 4.1 节和第五章中作出了规定，因此本章中就不再设立专节进行介绍，但值得提一下的是 IUPAC-2013 建议在链状烃时主链的选择取决于链长，而不是不饱和度。

例：



而不是 3,4-二丙基己-1,3-二烯-5-炔 (3,4-dipropylhexa-1,3-dien-5-yne) (中国化学会—1980)

6.1. 卤素，硝基，亚硝基，偶氮，重氮，叠氮化合物 (halogen, nitro, nitroso, azo, diazo, and azido compounds)

6.1.1. 卤素化合物 (halogen compounds)

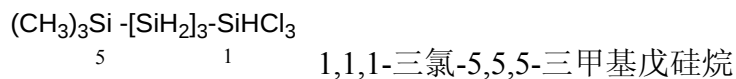
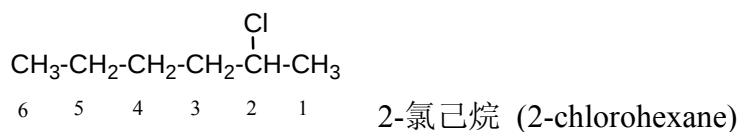
某些俗名仍保留外(见表 6-1-1)，其它卤素化合物按照二个方式进行系统命名。

表 6-1-1. 保留俗名的卤素化合物

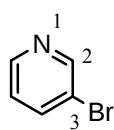
分子式	中文	英文
CHF ₃	氟仿	Fluoroform
CHCl ₃	氯仿	Chloroform
CHBr ₃	溴仿	Bromoform
CHI ₃	碘仿	Iodoform
COCl ₂	光气	Phosgene
CSCl ₂	硫光气	Thiophosgene

取代操作法命名时采用在母体化合物名称前加前缀 ‘氟代’， ‘氯代’， ‘溴代’，或 ‘碘代’，前缀中的代字通常省略。

例:



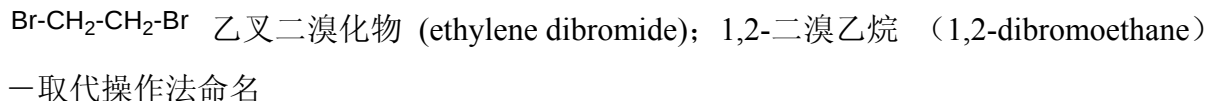
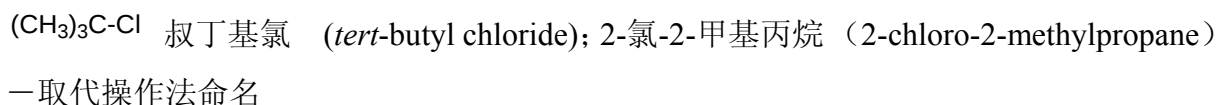
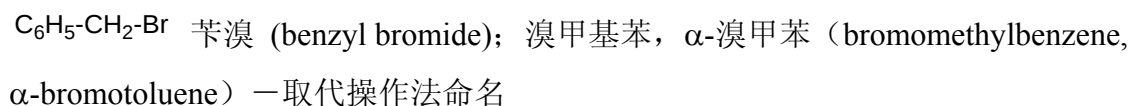
(1,1,1-trichloro-5,5,5-trimethylpentasilane)



3-溴吡啶 (3-bromopyridine)

官能团类别命名则由有机‘基团’后随类别名‘氟化物’，‘氯化物’，‘溴化物’或‘碘化物’而形成，通常‘化物’二字省略。若需要，加上位次前缀。一般讲来，卤素化合物均可由二类命名法给出二个名称，但官能团类别命名法的名称较少采用，或仅见于一些简单的化合物。

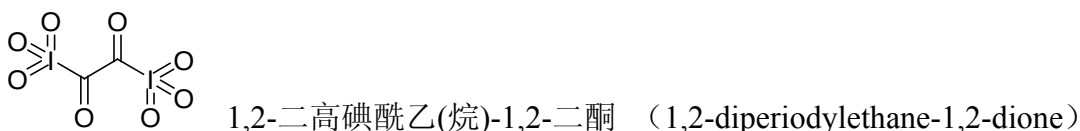
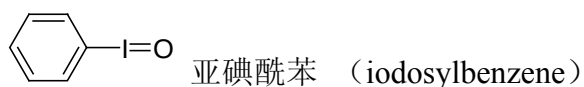
例:



含有基团 $-\text{XO}$, $-\text{XO}_2$, $-\text{XO}_3$ (X =卤素)的化合物可采用下列前缀进行取代操作法命名:

- $-\text{XO}$ 亚氯酰基 (chlorosyl), 亚溴酰基 (bromosyl), 亚碘酰基 (iodosyl), 亚氟酰基 (fluorosyl)
- $-\text{XO}_2$ 氯酰基 (chloryl), 溴酰基 (bromyl), 碘酰基 (iodyl), 氟酰基 (fluoryl)
- $-\text{XO}_3$ 高氯酰基 (perchloryl), 高溴酰基 (perbromyl), 高碘酰基 (periodyl), 高氟酰基 (perfluoryl)

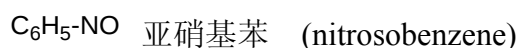
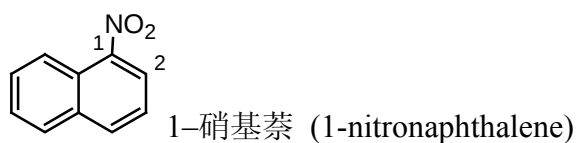
例:



6.1.2. 硝基和亚硝基化合物 (nitro, and nitroso compounds)

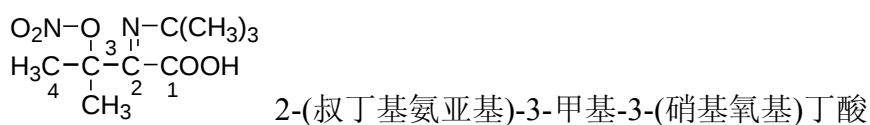
含有一个 $-\text{NO}_2$ 或 $-\text{NO}$ 基团化合物的命名可采用分别加前缀‘硝基’或‘亚硝基’。

例:



对于含有更高位特性基团的结构命名时, 连于碳原子以外的‘硝基’或‘亚硝基’也可类似地将其作为前缀来进行命名。

例:



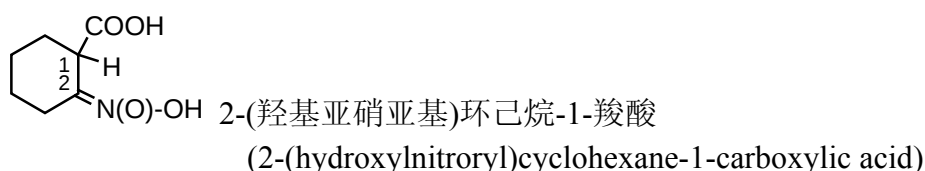
(2-(*tert*-butylimino)-3-methyl-3-(nitrosooxy)butanoic acid)



含有 $=N(O)OH$ 基团的化合物可命名为官能性母体化合物氮酸(azinic acid) $H_2N(O)OH$ 的衍生物或使用前缀羟基亚硝亚基 (hydroxynitrolyl)的方法 (见 4.3 节表 4-2)。

例:

$CH_2=N(O)-OH$ 甲亚基氮酸 (methylenediazinic acid)



6.1.3. 偶氮, 偶氮氧, 重氮, 以及有关化合物(azo, azoxy, diazo, and related compounds)

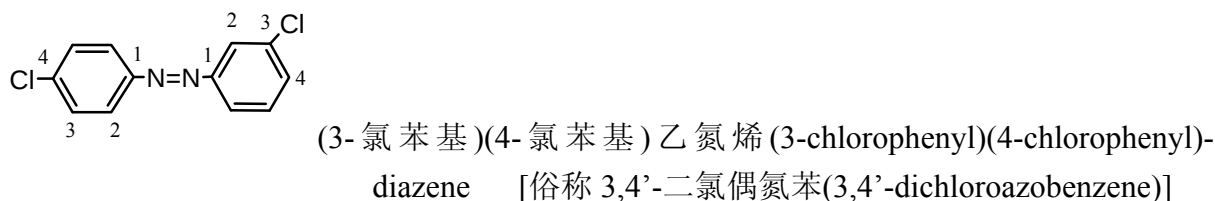
6.1.3.0. 乙氮烯(diazenes). 母体结构 $HN=NH$ 命名为乙氮烯(diazene), 由其衍生的基团, 即 $HN=N-$ 和 $-N=N-$, 则各自系统地命名为乙氮烯基(diazenyl)和乙氮烯叉基(diazenediyl)。

6.1.3.1. 偶氮化合物 (azo compounds) 有通用结构 $R-N=N-R'$, 其中 R 和 R' 能相同或不同, 通常称为‘偶氮化合物’。然而, 这类化合物能更系统地以取代操作法命名为母体乙氮烯(diazene)氯化物的衍生物。

例:

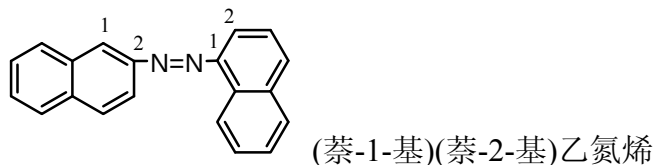
$CH_3-N=N-CH_3$ 二甲基乙氮烯(dimethyldiazene) [俗称偶氮甲烷 (azomethane)]

$C_6H_5-N=N-C_6H_5$ 二苯基乙氮烯(diphenyldiazene) [俗称偶氮苯(azobenzene)]



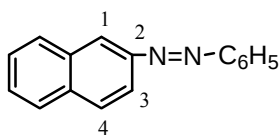
$CH_2=CH-N=N-CH_3$ 甲基乙烯基乙氮烯(methyl(vinyl)diazene)

[俗称乙烯偶氮甲烷(ethene azomethane)]



(naphthalene-1-yl)(naphthalene-2-yl)diazene)

[俗称 1,2'-偶氮萘(1,2'-azonaphthylene)]

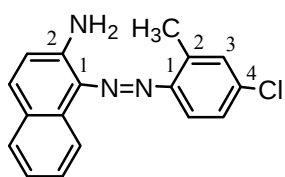


(萘-2-基)苯基乙氮烯 ((naphthalene-2-yl)phenyldiazene)

[俗称萘-2-偶氮苯(naphthalene-2-azobenzene)]

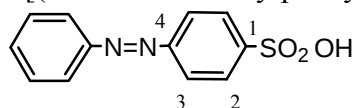
在一个单偶氮化合物有通用结构 $R-N=N-R'$ 中 R 为一主要特性基团所取代, 其命名将基于母体氢化物 RH , $R'-N=N-$ 则作为一个有机乙氮烯基取代基团。如果 R 和 R' 二者均为同样数目的主要特性基团所取代, 那就使用一复合命名。

例:



[(4-氯-2-甲基苯-1-基)乙氮烯基]萘-2-胺

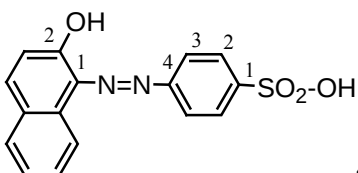
(1-[(4-chloro-2-methylphenyl)diazenyl]aphthalen-2-amine)



4-(苯基乙氮烯基)苯磺酸

(4-(phenyldiazenyl)benzenesulfonic acid)

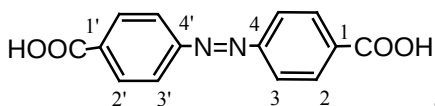
[俗称 4-(苯基偶氮基)苯磺酸(4-(phenylazo)benzenesulfonic acid)]



4-[(2-羟基萘-1-基)乙氮烯基]苯-1-磺酸

(4-[2-hydroxynaphthalen-1-yl]diazenyl)benzene-1-sulfonic acid)

[俗称 4-[(2-羟基-1-萘基)偶氮]苯磺酸(4-[(2-hydroxy-1-naphthyl)azo]benzenesulfonic acid)]

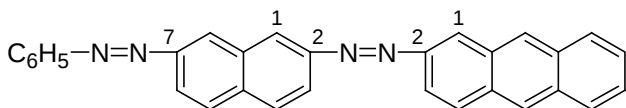


4,4'-乙氮烯叉基二苯甲酸(4,4'-diazenediylidibenzoic acid)

[俗称 4,4'-偶氮二苯甲酸 (4,4'-azodibenzoic acid)]

假如缺少更优先的母体化合物时, 双偶氮化合物以及更复杂类似物则是基于母体结构“乙氮烯”来命名。

例:



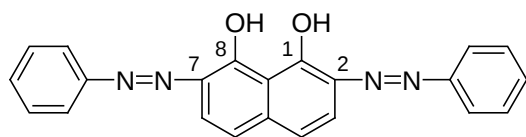
(萘-2-基)[(7-苯乙氮烯基)萘-2-基]乙氮烯

((anthracen-2-yl)[7-phenyldiazenyl]naphthalene-2-yl)diazene)

[俗称 蒽-2-偶氮-2'-萘-7'-偶氮苯(anthracene-2-azo-2'-naphthalene-7'-azobenzene)]

当有优先作为后缀的特性基团存在时,则偶氮基团以“乙氮烯基”为前缀来进行命名。

例:



2,7-二(苯基乙氮烯基)萘-1,8-二酚

(2,7-bis(phenyldiazenyl)naphthalene-1,8-diol)

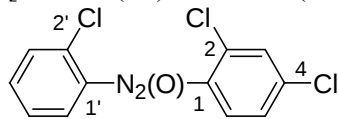
[俗称 2,7-二(苯基偶氮(基))萘-1,8-二酚 2,7-bis(phenylazo)naphthalene-1,8-diol]

6.1.3.2. 偶氮氧化合物(azoxy compounds) 有通用结构 $R-N_2(O)-R$ 或 $R-N_2(O)-R'$ 的偶氮化合物的 *N*-氧化物通常称为‘偶氮氧化物’,它们的命名由加‘氧化物’至相应的偶氮化合物名-乙氮烯后形成。在不对称偶氮氧化物时氧原子以位次 1 或 2 加以标明。

例:

$C_6H_5-N_2(O)-C_6H_5$ 二苯乙氮烯氧化物 (diphenyldiazene oxide)

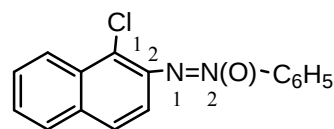
[俗称氧(化)偶氮基苯(azoxybenzene)]



(2-氯苯基)(2,4-二氯苯基)乙氮烯氧化物(氧的位置未定)

((2-chlorophenyl)-(2,4-dichlorophenyl)diazene oxide)

[俗称 2,2',4-三氯氧(化)偶氮基苯(2,2',4-trichloazoxybenzene)]

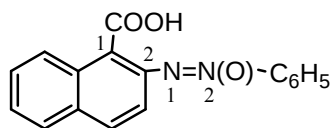


1-(1-氯-2-萘基)-2-苯基乙氮烯-2-氧化物 1-(1-chloro-2-naphthyl)-2-phenyldiazene-2-oxide

[俗称 1-氯萘-*NNO*-氧(化)偶氮基苯(1-chloronaphthalene-*NNO*-azoxybenzene)]

有通用结构 $R-N=N(O)-R'$ 或 $R-N(O)=N-R'$ 的氧化偶氮化物中,如 R 是取代有主特性基团时,则将基于母体氢化物 RH , R' -氧化偶氮基作为取代基而进行命名,氧化偶氮基的中氧原子位置用相应的前缀 *NNO*-, *ONN*-, 或 *NON*-进行标注。

例:



2-(苯基-*ONN*-氧(化)偶氮基)-1-萘甲酸

(2-(phenyl-*ONN*-azoxy)-1-naphthoic acid)

此外，化合物命名也可基于母体氢化物乙氮烯而不顾主要特性基团，因此，上述化合物也能命名为：1-(1-羧基萘-2-基)-2-苯基乙氮烯-2-氧化物

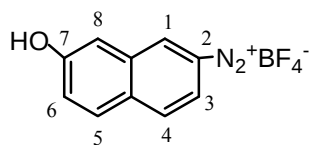
[1-(1-carboxy-2-naphthyl)-2-phenyldiazene 2-oxide]。

6.1.3.3. 重氮正离子化合物(diazonium compounds)。有通用结构 $R-N_2^+X^-$ 的化合物命名时，采用母体氢化物 RH 加上后缀‘重氮盐(正离子)’，再以负离子‘ X^- ’名为前缀而组成。（英文中则以负离子‘ X^- ’名加空格置于最后）

例：

$CH_3-CH_2-N_2^+Cl^-$ 氯化乙烷重氮盐 (ethanediazonium chloride)

$C_6H_5-N_2^+Cl^-$ 氯化苯重氮盐 (benzenediazonium chloride)



四氟硼酸 7-羟基萘-2-重氮盐

(7-hydroxynaphthalene-2-diazonium tetrafluoroborate)

6.1.3.4. 有通用结构 $R-N=N-X$ 偶氮化合物应作为母体结构乙氮烯 $HN=NH$ 的衍生物来进行命名。

例：

$C_6H_5-N=N-OH$ 苯乙氮烯醇(phenyldiazenol)[俗称氢氧化重氮苯(benzenediazohydroxide)]

$C_6H_5-N=N-O^-Na^+$ 苯乙氮烯醇钠(sodium phenyldiazenolate)

[俗称苯重氮酸钠 sodium benzenediazoate]

$C_6H_5-N=N-SO_3^-Na^+$ 苯乙氮烯磺酸钠(sodium phenyldiazenesulfonate)

[俗称苯重氮磺酸钠(sodium benzenediazosulfonate)]

6.1.3.5. 重氮化合物(diazo compounds) N_2 基团的一个氮原子连接到一个碳原子的化合物命名采用母体氢化物的名称加前缀‘重氮’的方式。

例：

CH_2N_2 重氮甲烷(diazomethane)

$N_2CH-CO-O-C_2H_5$ 重氮乙酸乙酯(ethyl diazoacetate)

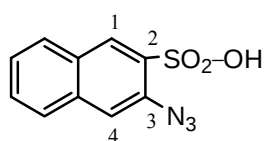
6.1.4. 叠氮化合物(azides)

N_3 ($-N=N^+=N^-$) 基团中一个氮原子连接到母体氢化物的化合物命名有二种方式:

(a)在取代操作法命名时, 以前缀‘叠氮-’加到母体氢化物 RH 名称前; 或者(b) 在官能团类别命名时, 则由 R 基团的名称后加类别名‘叠氮化物’而构成。

例:

$C_6H_5-N_3$ (a)叠氮苯 (azobenzene) (b)苯基叠氮化物 (phenyl azide)



(a) 3-叠氮萘-2-磺酸 (3-azidonaphthalene-2-sulfonic acid)

6.1.5. 异乙氮烯 (isodiazene)

有通用结构 $R_2N-N: \leftrightarrow R_2N^+=N^-$ 的化合物可以取代操作法命名为母体‘离子基’肼亚基 (hydrazinyli-dene)的衍生物, 或者基于俗名异乙氮烯进行命名。

例:

$(CH_3)_2N-N: \leftrightarrow (CH_3)_2N^+=N^-$ 二甲基异乙氮烯(dimethylisodiazene)
二甲基肼亚基(dimethylhydrazinyli-dene)

6.2. 胺和亚胺 (Amines and imines)

类名“胺”适用于化合物 NH_2R 、 $NHRR'$ 和 $NR'R''R'''$, 它们又分别归类为一级胺(伯胺)、二级胺(仲胺)和三级胺(叔胺)。

胺和亚胺的盐的命名方法是: 先写出正离子(见 6.7.2 节)的名字, 然后写负离子的名字。除了在编写索引和极为复杂的情况下, 不鼓励使用诸如胺盐酸盐这样的名字。

环状胺和亚胺的命名参见第三章的杂环命名。

6.2.1. 伯胺 (Primary amines)

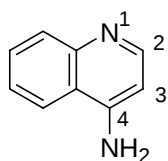
伯胺 NH_2R 可按以下三种命名方法之一来命名:

- (a) 将取代基 R 的名称作为前缀加到母体氢化物氨烷的前面;
- (b) 将后缀“-胺”加到母体氢化物 RH 的名称的后面, IUPAC-2013 建议优先采用此类命名法;
- (c) 将“-胺”加到基团 R 的取代基名后面构成。

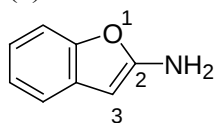
例:



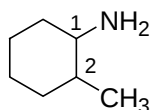
- (a) 乙基氮烷 (Ethylarane)
 (b) 乙烷胺 (Ethanamine)
 (c) 乙基胺 (Ethylamine)



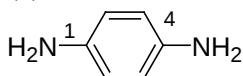
- (a) 4-喹啉基氮烷 (4-Quinolylarane)
 (b) 喹啉-4-胺 (Quinolin-4-amine)
 (c) 4-喹啉基胺 (4-Quinolylamine)



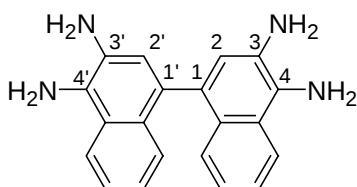
- (a) 1-苯并呋喃-2-基氮烷 (1-Benzofuran-2-ylazane)
 (b) 1-苯并呋喃-2-胺 (1-Benzofuran-2-amine)
 (c) 1-苯并呋喃-2-基胺 (1-Benzofuran-2-ylamine)



- (b) 2-甲基环己烷胺 (2-methylcyclohexan-1-amine)
 (c) (2-甲基环己基) 胺 ((2-methylcyclohexyl)amine)



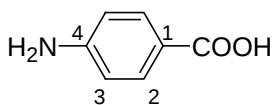
- (b) 苯-1,4-二胺 (benzene-1,4-diamine)
 (c) 苯-1,4-叉基二胺, 对苯叉基二胺 (1,4-phenylenediamine, *p*-phenylenediamine)



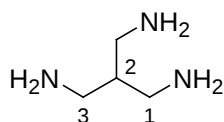
- (a) [1,1'-联萘-3,3',4,4'-四基]四氮烷 ([1,1'-Binaphthalene-3,3',4,4'-tetrayl]tetrakis(azane))
 (b) [1,1'-联萘]-3,3',4,4'-四胺 ([1,1'-Binaphthalene-3,3',4,4'-tetramine)
 (c) [1,1'-联萘-3,3',4,4'-四基]四胺 ([1,1'-Binaphthalene-3,3',4,4'-tetrayl]tetramine)

当它不是主要的特性基团时, 或当不是所有的-NH₂ 基团都能用后缀表达时, -NH₂ 基团可用前缀“氨基-” (amino-) 命名。

例:



- 4-氨基苯甲酸 (首选) (4-Aminobenzoic acid)
p-氨基苯甲酸 (*p*-Aminobenzoic acid)



(b) 2-(氨基甲基)丙烷-1,3-二胺 (2-(aminomethyl)propane-1,3-diamine)

(c) [2-(氨基甲基)丙-1,3-叉基]二胺 ([2-(aminomethyl)propan-1,3-diyl]diamine)

另外，英文中还保留一些俗名，但中文中基本仍为系统命名（表 6-2-1）。

表 6-2-1 保留俗名的伯胺

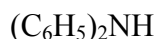
类型 I —取代无限制 苯胺 (Aniline)	 联苯胺 (Benzidine) 4,4'-联苯二胺
类型 III —无取代 对甲苯胺 (Toluidine)	

6.2.2. 仲胺和叔胺 (Secondary and tertiary amines)

对称的仲胺 NHR_2 和 NR_3 叔胺可按照以下前两种方法来命名，但 IUPAC-2004 建议也可采用第三种命名方法：

- 在取代基 R 的名字的前面分别加上“二”或“三”构成前缀，将它加在母体氢化物氮烷的前面；
- 在取代基 R 的名称的前面分别加上“二”或“三”构成前缀，后面加“胺”为后缀。
- 与下述不对称仲胺和叔胺同样的命名方式，将其作为伯胺 RNH_2 或仲胺 R_2NH 的 *N*-取代衍生物。此法给出的名称不简洁，本建议对此持保留态度。

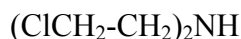
例：



(a) 二苯基氮烷 (Diphenylazane)

(b) 二苯基胺 (Diphenylamine)

(c) *N*-苯基苯胺 (*N*-phenylaniline)



(a) 二(2-氯乙基)氮烷 (Bis(2-chloroethyl)azane)

(b) 二(2-氯乙基)胺 (Bis(2-chloroethyl)amine)

2,2'-二氯二乙基胺 (2,2'-Dichlorodiethylamine)

(c) 2-氯-*N*-(2-氯乙基)乙烷胺 2-chloro-*N*-(2-chloroethyl)ethanamine



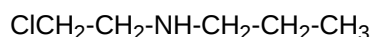
- (a) 三乙基氮烷 (Triethylazane)
- (b) 三乙基胺 (Triethylamine)
- (c) *N,N*-二乙基乙烷胺 (*N,N*-diethylethanamine)

不对称的仲胺和叔胺 NHRR' 、 $\text{NR}_2\text{R}'$ 和 $\text{NRR}'\text{R}''$ 可按照以下三种方法来命名:

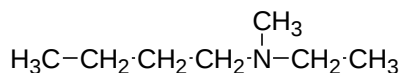
- (a) 作为母体氢化物氮烷的取代衍生物;
- (b) 作为伯胺 RNH_2 或仲胺 R_2NH 的 *N*-取代衍生物, 按 5.3 节的规则确定作为词根的母体氢化物, 其余的作为 *N*-取代基;
- (c) 将所有的取代基团 R 、 R' 或 R'' 的名称加以相应的数字前缀后紧接着加上类名“胺”字。

在不对称仲胺和叔胺的名称中的取代基团按字母顺序排列, 并用括号分开。

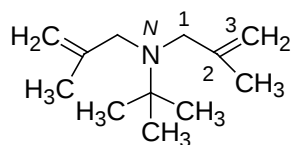
例:



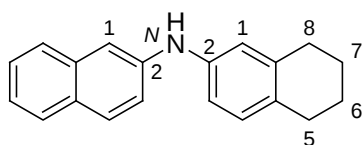
- (a) (2-氯乙基)(丙基)氮烷 ((2-Chloroethyl)(propyl)azane)
- (b) *N*-(2-氯乙基)丙烷-1-胺 (*N*-(2-Chloroethyl)propan-1-amine)
- N*-(2-氯乙基)丙胺 (*N*-(2-Chloroethyl)propylamine)
- (c) (2-氯乙基)(丙基)胺 ((2-Chloroethyl)(propyl)amine)



- (a) 丁基(乙基)甲基氮烷 (Butyl(ethyl)methylazane)
- (b) *N*-乙基-*N*-甲基丁烷-1-胺 (*N*-Ethyl-*N*-methylbutan-1-amine)
- N*-乙基-*N*-甲基丁胺 (*N*-Ethyl-*N*-methylbutylamine)
- (c) 丁基(乙基)甲基胺 (Butyl(ethyl)methylamine)



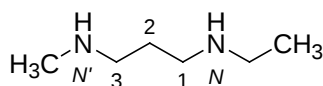
- (a) (2,2-二甲基丙基)双(2-甲基丙-2-烯-1-基)氮烷
((2,2-dimethylpropyl)bis(2-methylprop-2-en-1-yl)azane)
- (b) *N*-(2,2-二甲基丙基)-2-甲基-*N*-(2-甲基丙-2-烯-1-基)丙-2-烯-1-胺
(*N*-(2,2-dimethylpropyl)-2-methyl-*N*-(2-methylprop-2-en-1-yl)prop-2-en-1-amine)
- (c) (2,2-二甲基丙基)双(2-甲基丙-2-烯-1-基)胺
((2,2-dimethylpropyl)bis(2-methylprop-2-en-1-yl)amine)



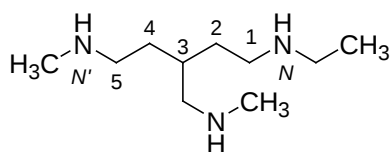
- (a) 萘-2-基(5,6,7,8-四氢萘-2-基)氮烷
(2-naphthyl(5,6,7,8-tetrahydro-2-naphthyl)azane)
- (b) *N*-(5,6,7,8-四氢萘-2-基)萘-2-胺
(*N*-(5,6,7,8-tetrahydronaphthalen-2-yl)naphthalen-2-amine)
- (c) 萘-2-基(5,6,7,8-四氢萘-2-基)胺
(2-naphthyl(5,6,7,8-tetrahydro-2-naphthyl)amine)

对于含有二个、三个或更多胺结构单元化合物的命名可采用类似方法，可用 *N*, *N'* 等作为前缀来标明不同氮上的取代基，如此会引起混淆时按 IUPAC-2013 建议则可以该氮原子所连接母体氢化物上的位次以上标方式，同时作为前缀来标明其上的取代基。

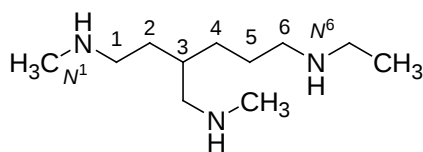
例：



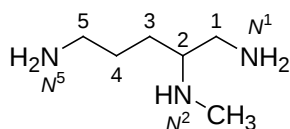
- (b) *N*-乙基-*N'*-甲基丙烷-1,3-二胺 (*N*-ethyl-*N'*-methylpropane-1,3-diamine)
- (c) *N*-乙基-*N'*-甲基(丙-1,3-叉基二胺) (*N*-ethyl-*N'*-methyl(propane-1,3-diyl)diamine)



- (b) *N*-乙基-*N'*-甲基-3-[(甲基氨基)甲基]戊烷 1,5-二胺
(*N*-ethyl-*N'*-methyl-3-[(methylamino)methyl]pentane-1,5-diamine)
- (c) *N*-乙基-*N'*-甲基-3-[(甲基氨基)甲基](戊-1,5-叉基二胺)
(*N*-ethyl-*N'*-methyl-3-[(methylamino)methyl](pentane-1,5-diyl)diamine)



- (b) *N*⁶-乙基-*N*¹-甲基-3-[(甲基氨基)甲基]己烷-1,6-二胺
(*N*⁶-ethyl-*N*¹-methyl-3-[(methylamino)methyl]hexane-1,6-diamine)
- (c) *N*⁶-乙基-*N*¹-甲基-3-[(甲基氨基)甲基](己-1,6-叉基二胺)
(*N*⁶-ethyl-*N*¹-methyl-3-[(methylamino)methyl](hexane-1,6-diyl)diamine)

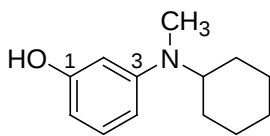


- N*²-甲基戊烷-1,2,5-三胺 (*N*²-methylpentane-1,2,5-triamine)

当 NHRR' 、 $\text{NR}_2\text{R}'$ 和 $\text{NRR}'\text{R}''$ 不是主要的特性基团时，或当不都能用后缀表达时，它们可用前缀“烃基氨基-”（(R)-amino-）命名。注意当作为取代基前缀时，中文中统一采用“烃基氨基-”，而不能写作“烃基胺基-”，此相当于英文中前缀用(R)-amino-，而后缀用(R)-amine。

例：

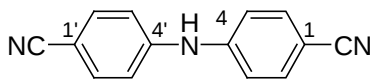
如上二例中的 $\text{CH}_3\text{NH}-$ 为甲基氨基-（methylamino-）



3-[环己基(甲基)氨基]苯酚（3-[cyclohexyl(methyl)amino]phenol）

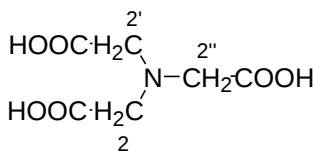
对可采用复合操作命名法（Multiplicative operation）结构中的 $-\text{N}<$ 可用前缀‘氨爪基’（nitrilo）， $-\text{NH}-$ ($\text{HN}<$)可用前缀‘氨叉基’（azanediyl）进行命名。

例：



4,4'-氨叉基二苯腈（4,4'-azanediylbis(benzonitrile)）

4-[(4-氰基苯基)氨基]苯腈（4-[(4-cyanophenyl)amino]benzonitrile）—取代命名法



2,2',2''-氨爪基三乙酸（2,2',2''-nitrilotriacetic acid）

N,N-二(羧基甲基)甘氨酸（*N,N*-bis(carboxymethyl)glycine）—取代命名法

6.2.3. 亚胺（Imines）

通式为 $\text{R}-\text{CH}=\text{NR}'$ 或 $\text{RR}''\text{C}=\text{NR}'$ （其中 R' 可以是 H ）的化合物通常可分别称为醛亚胺或酮亚胺。通式为 $\text{R}-\text{CH}=\text{NH}$ 或 $\text{RR}'\text{C}=\text{NH}$ 的亚胺又可命名为母体氢化物氮烷的“-亚基”衍生物，或者用后缀“-亚胺”加至母体氢化物 $\text{R}-\text{CH}_3$ 或 $\text{R}-\text{CH}_2-\text{R}'$ 的名称后来命名，英文中则将后缀“-imine”取代母体氢化物 $\text{R}-\text{CH}_3$ 或 $\text{R}-\text{CH}_2-\text{R}'$ 的名称中最后一个字母“e”（如果存在这个字母 e 的话）来命名。通式为 $\text{R}-\text{CH}=\text{N}-\text{R}'$ 或 $\text{RR}''\text{C}=\text{NR}'$ 的化合物也可命名为 *N*-取代的亚胺或者命名为胺 $\text{R}'-\text{NH}_2$ 的“亚基”衍生物。（见 6.2.1 和 6.2.2 节）

注：上述的类名“醛亚胺”和“酮亚胺”是从诸如“苯甲醛亚胺”或“甲基乙基酮亚胺”之类的名称派生而来的，其中“亚胺”是功能性修饰语。

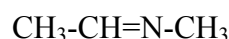
例：



己亚基氮烷 (Hexylideneazane)

己烷-1-亚胺 (Hexan-1-imine)

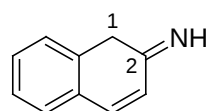
己亚基胺 (Hexylideneamine)



乙亚基(甲基)氮烷 (Ethylidene(methyl)azane)

N-甲基乙烷亚胺 (*N*-Methylethanamine)

N-甲基乙亚基胺 (*N*-Methylethylideneamine)

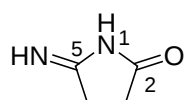


萘-2(1*H*)-亚胺 (Naphthalen-2(1*H*)-imine)

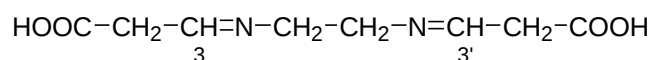
1,2-二氢萘-2-亚胺 (1,2-dihydronaphthalen-2-imine)

当不是主要的特性基团时，=NH 基团可用前缀“氨亚基-” (imino-) 命名。对可
采用复合操作命名法 (Multiplicative operation) 结构中的 -N= 可用前缀“氨基亚基-”
(azanylylidene) 来命名。

例：



5-氨亚基吡咯烷-2-酮 (5-iminopyrrolidin-2-one)



3,3'-[乙-1,2-叉基二(氨基亚基)]二丙酸

(3,3'-[ethane-1,2-diylbis(azanylylidene)]dipropionic acid)

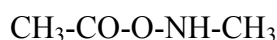
6.2.4. 羟胺 (Hydroxylamines)

通式为 R-NH-OR' 的化合物的命名可以官能性母体化合物“羟基胺”为基础，用取代的方法来进行，同时使用位次码 *N*-或 *O*-来区分在 N 上或是在 O 上的取代；或者，通过将前缀“羟基氨基- (hydroxyamino-)”、“烷氧基氨基- (alkoxyamino-)”或“芳氧基氨基- (aryloxyamino-)”加在母体氢化物 R-H 的名称的前面来命名。

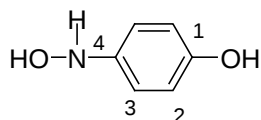
例:



N-苯基羟胺 (*N*-PhenylHydroxylamine)



O-乙酰-*N*-甲基羟胺 (*O*-Acetyl-*N*-methylHydroxylamine)

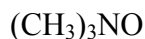


4-(羟基氨基)苯酚 (4-(Hydroxyamino)phenol)

6.2.5. 胺氧化物 (Amino oxides)

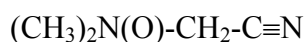
通式为 R_3NO 的化合物 (其中 R 基团可以相同或者不相同) 的命名方法是通过将类名“氧化物”加在胺 R_3N 的后面而成。环状的类似物按相同的方法命名, 如果需要, 用环原子的位次 (优先用阿拉伯数字, 但也可用大写斜体的元素符号为位次码) 来表示氧原子的位置。如果需要, $\text{R}_2\text{N(O)}$ -基团可用由氮酰基 (“azinoyl-”) (或二氢亚硝基 (dihydrnitrolyl-)) 派生而来的前缀来定名。

例:

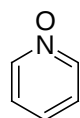


三甲基氮烷氧化物 (Trimethylazane oxide)

三甲胺氧化物 (Trimethylamine oxide)



(二甲基氮酰基)乙腈, (二甲基亚硝基)乙腈 ((Dimethylazinoyl)acetonitrile)



吡啶 1-氧化物 (首选) (Pyridine 1-oxide)

吡啶 *N*-氧化物 (Pyridine *N*-oxide)

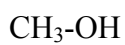
6.3. 羟基化合物及其衍生物和类似物

6.3.1. 羟基化合物和类似物

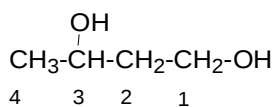
6.3.1.1. 醇和酚 (Alcohols and phenols) 在取代命名法中, 羟基-OH 作为主特性基团时, 可酌情把后缀“-醇”或“-酚” (-ol)、“二醇”或“二酚” (diol) 等加在母体氢化物或芳烃名称后来进行命名。中文命名中将羟基连在芳环上的化合物 (phenols) 称作

‘酚’，且在命名时用作这类化合物名称的后缀，但英文中无此种区别，均使用“-ol”为后缀。

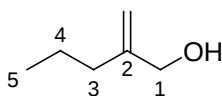
例：



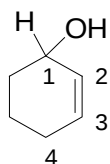
甲醇 (Methanol)



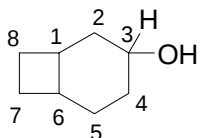
丁-1,3-二醇 (Butane-1,3-diol)



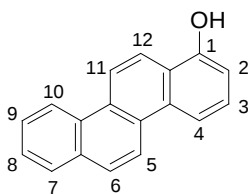
2-甲亚基己-3-醇 (2-methylidenehexan-3-ol)



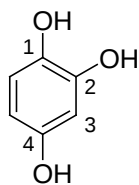
环己-2-烯-1-醇 (Cyclohex-2-en-1-ol)



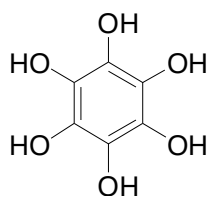
双环[4.2.0]辛-3-醇 (Bicyclo[4.2.0]octan-3-ol)



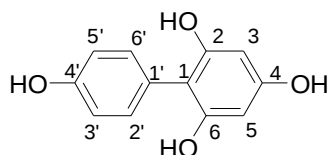
(⁺⁺屈) 芘-1-酚 (Chrysen-1-ol)



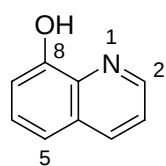
苯-1,2,4-三酚 (Benene-1,2,4-triol)



苯六酚 (Benzenehexol)



联苯-2,4,4',6-四酚 (Biphenyl-2,4,4',6-tetrol)

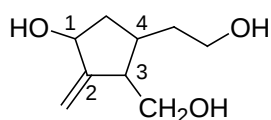


喹啉-8-酚 (Quinolin-8-ol)

8-羟基喹啉 (俗名, 8-Hydroxyquinoline) (另一英文俗名 ‘oxine’ 在此不推荐使用)

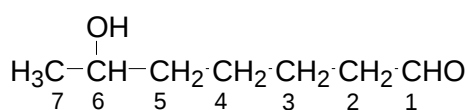
在有多个羟基存在, 且又不能都在后缀中表达时, 或还存在一个基团应优先作为主特性基团的情况下, 用前缀 “羟基-” 表示羟基基团。

例:

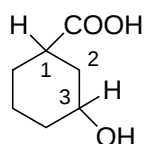


4-(2-羟乙基)-3-(羟甲基)-2-甲亚基环戊-1-醇

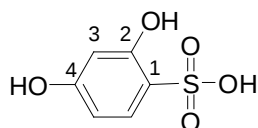
(4-(2-hydroxyethyl)-3-(hydroxymethyl)-2-methylenecyclopentan-1-ol)



6-羟基庚醛 (6-Hydroxyheptanal)



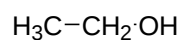
3-羟基环己烷甲酸 (3-Hydroxycyclohexanecarboxylic acid)



2,4-二羟基苯磺酸 (2,4-Dihydroxybenzenesulfonic acid)

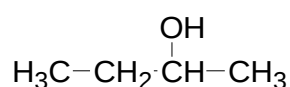
醇按官能团类别法命名时的名称是从相应的母体氢化物的名称衍生而来的取代基前缀加上类名“醇 (alcohol)”构成, 在中文中, 大多数场合下, 取代基的‘基’字省略。实际上中文中这与取代法命名, 母体氢化物名称省略烷字后加后缀“-醇 (-ol)”, 所得的名称是相同的。

例:



乙(基)醇 (Ethyl alcohol) (官能团类别法命名)

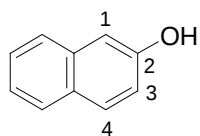
乙(烷)醇 (Ethanol) (取代法命名)



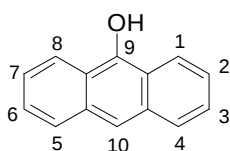
仲丁(基)醇 (*sec*-Butyl alcohol) (官能团类别法命名)

仲丁(烷)醇 (*sec*-Butanol) (取代法命名)

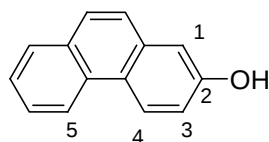
英文中对以下的结构及其位置异构体还保留简约的名称, 但中文仍为系统名:



2-萘酚 (2-Naphthol)



9-蒽酚 (9-Anthrol)

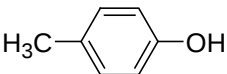
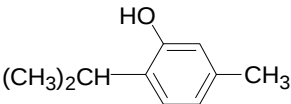
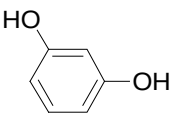
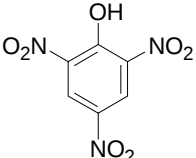
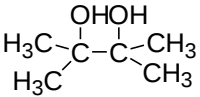
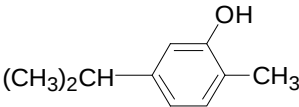
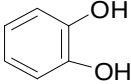
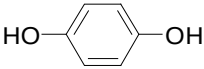


2-菲酚 (2-Phenanthrol)

一些保留俗名的羟基化合物和醚见下表 (表 6-3-1), 其中部份名称中文仍采用系统名。

表 6-3-1. 一些保留俗名的羟基化合物和醚

类型 I——无取代限制 $\text{C}_6\text{H}_5-\text{OH}$ 苯酚 (Phenol)	
--	--

类型 II——限制取代（限于环上） $\text{C}_6\text{H}_5-\text{O}-\text{CH}_3$ 茴香醚（Anisol）	
类型 III——无取代* $\text{HO}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{OH}$ 乙二醇（Ethylene glycol） $\text{C}(\text{CH}_2\text{OH})_4$ 季戊四醇（Pentaerythritol）  甲苯酚（对位异构体）（Cresol）  百里酚（Thymol）  间苯二酚（雷琐酚）（Resorcinol）  苦味酸（Picric acid）	$\text{HO}-\text{CH}_2-\overset{\text{H}}{\underset{\text{OH}}{\text{C}}}-\text{CH}_2-\text{OH}$ 甘油（Glycerol）  片呐醇 [#] （Pinacol）  香芹酚（Carvacrol）  焦儿茶酚（Pyrocatechol）  氢醌（Hydroquinone）

*羟基基团的氢原子的置换可被看作是官能化而非取代，例如，在形成酯的情况下，因此是被允许的。

[#]名称“片呐醇”也可用作类名。

6.3.1.2. 醇和酚的硫、硒、碲类似物（Sulfur, selenium, and tellurium analogues of alcohols and phenols）用“-硫醇（酚）（-thiol）”、“-硒醇（酚）（-selenol）”、“-碲醇（酚）（-tellurol）”等后缀，按相同的方法命名醇和酚的硫、硒、碲类似物，同时分别用“巯基-（sulfanyl-）”、“氢硒基-（selanyl-）”、“氢碲基-（tellanyl-）”等前缀来定名特性基团-SH、-SeH、-TeH。

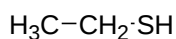
IUPAC 不推荐在酚的俗名中使用前缀“硫代”、“硒代”、“碲代”来表示羟基氧原子分别被硫、硒、碲置换。

在 1979 年版的 IUPAC 《有机化学命名法》中分别用前缀“mercapto-（巯基-）”和“hydroseleno-（氢硒基-）”来为 HS-和 HSe-命名，但在 1993 年后的建议中不推荐使用。

中文中我们建议仍使用习俗上的氢硫基-（巯基-）、氢硒基-等在命名时作为前缀，而不使用直译的甲硫烷基-、甲硒烷基-等。

羟基化合物的硫、硒、碲类似物的高位次序为： $O > S > Se > Te$ 。

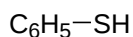
例：



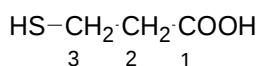
乙硫醇（Ethanethiol）



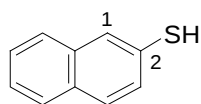
乙硒醇（Ethaneselenol）



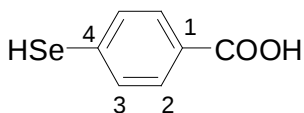
苯硫酚（而不是硫代苯酚）（Benzenethiol 而不是 Thiophenol）



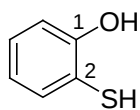
3-巯基丙酸（3-Sulfanylpropanoic acid）



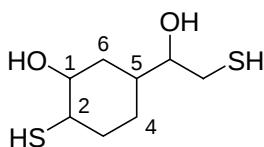
萘-2-硫酚（Naphthalene-2-thiol）



4-氢硒基苯甲酸（4-Selanylbenzoic acid）



2-巯基苯酚（2-sulfanylphenol）



5-(1-羟基-2-巯基乙基)-2-巯基环己烷-1-醇

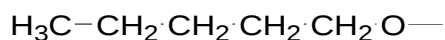
（5-(1-hydroxy-2-sulfanylethyl)-2-sulfanylcyclohexan-1-ol）

6.3.2. 由醇、酚及其类似物衍生而来的取代基前缀

基团 RO-的取代基前缀名称是通过在基团 R 的取代基前缀名称后面加上“氧基”

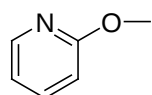
而形成的。英文中有简约的名称（表 6-3-2.），但中文中无此问题，只是中文中 R 基团后的‘基’字经常可省略。

例：



戊(基)氧基 (Pentyloxy)

戊-1-(基)氧基 (Pentan-1-yloxy)



2-吡啶(基)氧基 (2-Pyridyloxy)

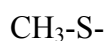
吡啶-2-(基)氧基 (Pyridin-2-yloxy)

表 6-3-2. 英文中有简约名称的羟基化合物衍生的取代基

类型 1——无限制取代 $\text{CH}_3\text{-O-}$ 甲氧基 (Methoxy) $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-O-}$ 乙氧基 (Ethoxy) $\text{CH}_3\text{-(CH}_2\text{)}_2\text{-O-}$ 丙氧基 (Propoxy)	$\text{CH}_3\text{-(CH}_2\text{)}_3\text{-O-}$ 丁氧基 (Butoxy) $\text{C}_6\text{H}_5\text{-O-}$ 苯氧基 (Phenoxy)
类型 3——无取代 $(\text{CH}_3)_2\text{CH-O-}$ 异丙氧基 (Isopropoxy) $(\text{CH}_3)_2\text{CH-CH}_2\text{-O-}$ 异丁氧基 (Isobutoxy)	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH(CH}_3\text{)-O-}$ 仲丁氧基 (<i>sec</i> -Butoxy) $(\text{CH}_3)_3\text{C-O-}$ 叔丁氧基 (<i>tert</i> -Butoxy)

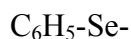
通过将基团 R 的前缀名称分别与“氢硫基- (sulfanyl-)”（见第 4 章表 4-1）、“氢硒基- (selanyl-)”或“氢碲基- (tellanyl-)”连接，形成 RS-、RSe-和 RTe-的取代基前缀名称。在 IUPAC《有机化学命名法》的前几个版本中，通过将“thio（硫代）”或“sleno（硒代）”加在基团 R 的取代基前缀名称后来形成 RS-和 RSe-的取代基前缀名称，但中文命名相同。

例：



甲(基)硫基 (Methylsulfanyl)

（习惯上称为甲硫基 (Methylthio)）



苯(基)硒基 (Phenylselanyl)

（习惯上称为苯硒基 (Phenylseleno)）

通过将“二氧(叉)基”或“二硫(叉)基”加在二价基团-Y的名称上来命名二价基团如-O-Y-O-和-S-Y-S-。

例：



甲叉(基)二氧(叉)基 (Methylenebis(oxy), Methylenedioxy)

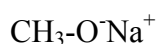


甲叉(基)二硫(叉)基 (Methylenebis(sulfanediy))

6.3.3. 由醇、酚及其类似物衍生而来的盐 (Salts)

由醇、酚和它们的硫属类似物失去硫属原子上的氢原子(以氢正离子的形式)而产生的负离子通过将其名称最后的“醇”或“酚”(“ol”)改为“醇盐”或“酚盐”(“olate”)来命名。英文中当基团 RO-有缩写名称,例如甲氧基时,可通过将末尾的“oxy”(“氧基”)改为“oxide”(“氧化物”)来命名负离子。

例：



甲醇钠 (Sodium methanolate)

甲氧(化)钠 (Sodium methoxide)



乙硫醇钠 (Sodium ethanethiolate)

乙(基)硫(化)钠 (Sodium ethyl sulfide)



二正丙醇镁 (Magnesium bis(propan-1-olate))

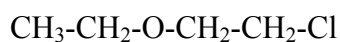
二正丙(基)氧(化)镁 (Magnesium dipropoxide)

6.3.4. 醚和硫属类似物 (Ether and chalcogen analogues)

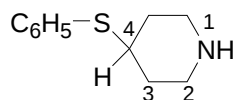
通式为 R-O-R'、R-S-R'、R-Se-R'和 R-Te-R'的化合物属类上分别称为“醚”、“硫醚”、“硒醚”和“碲醚”,可按照取代法、官能团类别法、或者置换法三者之一来命名。

6.3.4.1. 取代法名称是通过将基团 R'O-、R'S-、R'Se-、或 R'Te-的名称加在相应于 R 的母体氢化物的名称的前面而形成。当 R 和 R'基为环或环系时需选择高位的环为母体氢化物。

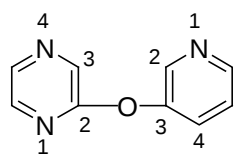
例：



1-氯-2-乙氧基乙烷 (1-Chloro-2-ethoxyethane)



4-(苯(基)硫基)哌啶 (4-(Phenylsulfanyl)piperidine)



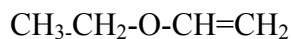
2-(吡啶-3-基氧基)哌嗪 (2-(3-Pyridyloxy)pyrazine)

6.3.4.2. 官能团类别法名称是通过将类别名称“醚”、“硫醚”、“硒醚”或“碲醚”放在基团 R 和 R' 名称（按字母顺序引用）的后面而形成，英文中基团名称后加空格，中文中不加空格，可能混淆时，可加括号分开。

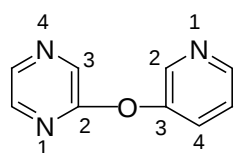
例：



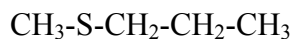
乙基甲基醚 (Ethyl methyl ether)



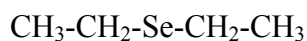
乙基乙烯基醚 (Ethyl vinyl ether)



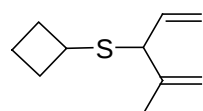
哌嗪-2-基(吡啶-3-基)醚 (Pyrazin-2-yl 3-pyridyl ether)



甲基丙基硫醚 (Methyl propyl sulfide)



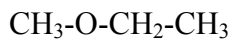
二乙基硒醚 (Diethyl selenide)



环丁基(2-甲基戊-1,4-二烯-3-基)硫醚
(cyclobutyl 2-methylpenta-1,4-dien-3-yl sulfide)

这些化合物也可以命名为相应的母体氢化物“氧烷”、“硫烷”、“硒烷”或“碲烷”的衍生物（参见 3.1 节中表）。

例：



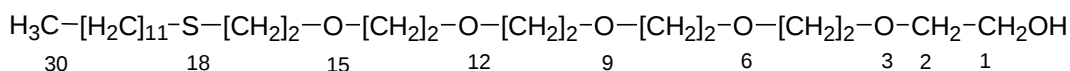
乙基（甲基）氧烷（Ethyl(methyl)oxidane）



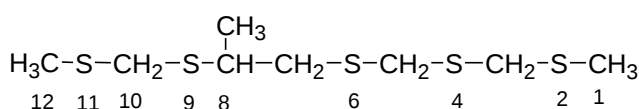
乙基（丙基）硫烷（Ethyl(propyl)sulfane）

6.3.4.3. 置换命名法（参见 2.2.2 节）用于命名线性聚醚、聚硫醚等。它对于具有几个硫属原子和具有几个不同的硫属原子的不对称结构特别方便。

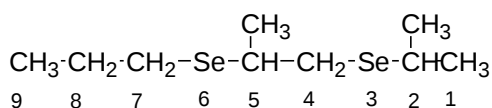
例：



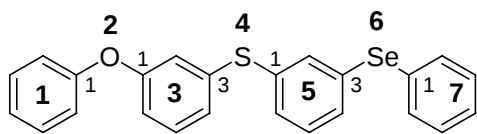
3,6,9,12,15-五氧杂-18-硫杂三十烷-1-醇（3,6,9,12,15-Pentaoxa-18-thiatriacontan-1-ol）



8-甲基-2,4,6,9,11-五硫杂十二烷（8-Methyl-2,4,6,9,11-pentathiadodecane）



2,5-二甲基-3,6-二硒杂壬烷（2,5-Dimethyl-3,6-diselenanonane）



2-氧杂-4-硫杂-6-硒杂-1,7(1),3,5(1,3)-四苯杂庚蕃

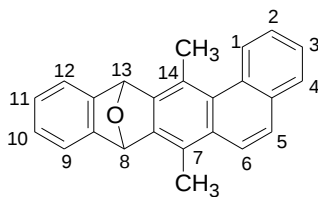
（2-oxa-4-thia-6-selena-1,7(1),3,5(1,3)-tetrabenzeneheptaphane）

6.3.4.4. 环醚. 一个氧原子直接连接到已经是环系统一部分的两个原子上,或者连接到链结构的两个碳原子上,可以作为(a)命名为杂环,这时要遵从命名杂环的有关推荐,包括使用前缀“环氧”作为桥前缀;或者(b)通过使用取代基前缀“环氧”,并与其他取代基前缀按字母顺序排列。当想要保留特殊结构名称,例如在命名天然产物(如甾体和类胡萝卜素)时,后一种方法特别有用。

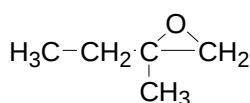
类别名称“氧化物”也可用来以加合法命名环醚,例如乙烯氧化物(ethylene oxide,

中文俗称环氧乙烷)和苯乙烯氧化物(styrene oxide, 中文俗称氧化苯乙烯)。

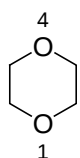
例:



- (a) 7,14-二甲基-8,13-二氢-8,13-氧桥苯并[a]并四苯
(7,14-Dimethyl-8,13-dihydro-8,13-epoxybenzo[a]tetracene)



- (a) 2-乙基-2-甲基氧杂丙环烷 (2-Ethyl-2-methyloxirane)
(b) 1,2-环氧-2-甲基丁烷 (1,2-Epoxy-2-methylbutane)

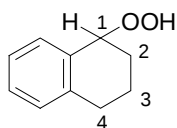


- (a) 1,4-二噁己环烷, 1,4-二氧杂环己烷 (中文俗称二氧六环) (1,4-dioxane)

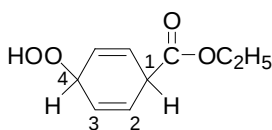
6.3.5. 氢过氧化物和过氧化物 (Hydroperoxides and peroxides)

通式为 RO-OH 的化合物类别上称为“氢过氧化物”, 取代命名法是通过在相应于 R 的母体氢化物的名称的前面加上前缀“过羟基-(hydroperoxy-)”来命名, IUPAC-2013 建议也可采用后缀“过氧醇(peroxol)”来命名, 对此本建议认为可作为一种参考名。而官能团分类命名法则通过在基团 R 的前缀名称的后面加上类属名称“氢过氧化物”来命名。

例:



- 1-过羟基-1,2,3,4-四氢萘 (1-Hydroperoxy-1,2,3,4-tetrahydronaphthalene)
1,2,3,4-四氢萘-1-基氢过氧化物 (1,2,3,4-Tetrahydronaphth-1-yl hydroperoxide)
1,2,3,4-四氢萘-1-过氧醇 (1,2,3,4-Tetrahydronaphthalene-1-peroxol)

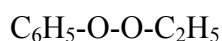


- 4-过羟基环己-2,5-二烯-1-甲酸乙酯

(Ethyl 4-hydroperoxycyclohexa-2,5-diene-1-carboxylate)

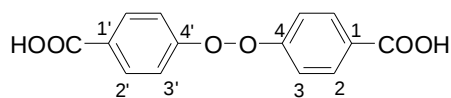
通式为 RO-OR' 的化合物类别上称为“过氧化物”，取代命名法是通过在相应于 R 的母体氢化物的名称的前面加上前缀“R'过氧基-”来命名的，而官能团类别命名法则通过在基团 R 和 R' 前缀名称的后面加上“过氧化物”来命名的。

例：



(乙基过氧基) 苯 ((Ethylperoxy)benzene)

乙基(苯基)过氧化物 (Ethyl phenyl peroxide)



4,4'-过氧基二苯甲酸 (4,4'-Peroxydibenzoic acid)

氢过氧化物按 IUPAC 的建议还可以被命名为母体氢化物“乙氧烷 (dioxidane)” HO-OH 的衍生物；例如 C₆H₅-O-OH 可被称为苯基乙氧烷 (Phenyldioxidane)。过氧化物也可以类似方式来命名；例如，C₆H₅-O-O-C₂H₅ 可以称为乙基 (苯基) 乙氧烷 (ethyl(phenyl)dioxidane)。另外，基团 -OO- 的前缀名称曾用“二氧(叉)基- (dioxy-)”。中文版建议尽量不使用此类命名方式。

6.3.6. 氢多硫化物和多硫化物 (Hydropolysulfides and polysulfides)

通式为 R-[S]_n-H 和 R-[S]_n-R' 的化合物类别上分别称为“氢多硫化物”和“多硫化物”。取代命名法将它们命名为多硫烷 H-[S]_n-H 的衍生物 (但硫链必须是线性的，见 3.2.2 节)，而官能团分类命名法则通过在基团 R 的前缀名称或者基团 R 和 R' 的名称的后面分别加上类别名称“氢多硫化物 (hydropolysulfide)”或“多硫化物 (polysulfide)”。硒和碲的类似物按照相同的方法命名，分别使用母体氢化物“多硒烷 (polyselane)”或“多碲烷 (polytellane)”和类别名称“氢多硒化物 (hydropolyselenide)”或“氢多碲化物 (hydropolytelluride)”和“多硒化物 (polyselenide)”或“多碲化物 (polytelluride)”。

对氢二硫化物和硒，碲类似物或与硒，碲，氧的混合物，IUPAC-2013 建议在取代命名法时也可参照氢过氧化物进行命名。作后缀时以“过氧醇 (peroxol)”为基础进行官能团置换法命名，如 -S-OH 为 -O-硫代过氧醇 (-O-thioperoxol)，-O-SeH 为 -OSe-碲代过氧醇 (-OSe-selenoperoxol)，-S-SH 为 -过硫醇 (二硫代过氧醇，dithioperoxol)。作前缀时则以前缀“过羟基 (hydroperoxy)”进行官能团置换法命名，如 SO-硫代过羟基

(*SO*-thiohydroperoxy), HSO-; 二硫代过羟基 (dithiohydroperoxy), HSS-。或以过巯基 (二硫烷基 disulfanyl), HSS-; 以及羟基 (hydroxy), HO-; 氧基 (oxy), -O-; 氢硒基 (selanyl), HSe-; 巯基 (氢硫基 sulfanyl), HS- 等简单前缀组成复合前缀, 如羟基硒基 (hydroxyselanyl), HO-Se-; 巯基氧基 (sulfanyloxy), HS-O-。

例:



乙基二硫烷 (Ethyl disulfane)

乙基氢二硫化物 (Ethyl hydrodisulfide)

乙烷过硫醇 (乙烷二硫代过氧醇, ethanedithioperoxol)



二苯基二硫烷 (Diphenyldisulfane)

二苯基二硫化物 (Diphenyl disulfide)



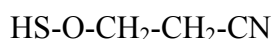
苯基三硒烷 (Phenyltriselenane)

苯基氢三硒化物 (Phenyl hydrotriselenide)



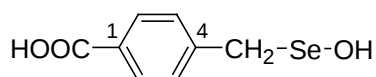
甲基(丙基)三硒烷 (Methyl(propyl)triselenane)

甲基(丙基)三硒化物 (Methyl propyl triselenide)



3-(巯基氧基)丙腈 (3-(sulfanyloxy)propanenitrile)

3-(*SO*-硫代过羟基)丙腈 (3-(*SO*-thiohydroperoxy)propanenitrile)



4-[(*OSe*-硒代过羟基)甲基]苯甲酸 (4-[(*OSe*-selenohydroperoxy)methyl]benzoic acid)

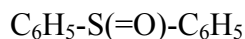
4-[(羟基硒基)甲基]苯甲酸 (4-[(hydroxyselanyl)methyl]benzoic acid)

6.3.7. 亚砷、砷和它们的类似物 (Sulfoxides, sulfones, and their analogues)

通式为 R-S(=O)-R' 和 $\text{R-S(=O)}_2\text{-R'}$ 的化合物类别上分别成为“亚砷”和“砷”。其取代命名法是通过在基团 R' 的前缀名称后面加“亚磺酰基 (sulfinyl)”或“磺酰基 (sulfonyl)”, 以及相应于 R 的母体氢化物的名称来命名 (IUPAC-2013 建议不采用基团 R' 的基名, 而用它的母体氢化物名称, 本建议在中文中采用此法)。在官能团类别命名法中, 则是通过在基团 R 和 R' 的前缀名称的后面分别加上类别名称“亚砷 (sulfoxide)”和“砷 (sulfone)”来命名。硒和碲的类似物按照相同方法命名, 使用前缀名称如“ R' -

亚磺酰基- (R'-seleninyl-)" 和 "R'-磺酰基 (R'-selenonyl-)" 和类别名称如 "亚磺 (selenoxide)" 和 "磺 (selenone)"。亚磺和磺还可以按照取代命名法这样命名：用前缀 "氧亚基-" 加在母体氢化物 λ^4 -和 λ^6 -硫烷名称前来说明化合物中的氧原子；例如， $(\text{C}_6\text{H}_5)_2\text{S}(=\text{O})_2$ 可被称为二氧亚基-二苯基- λ^6 -硫烷 (Dioxodiphenyl- λ^6 -sulfane)。

例：



(苯基亚磺酰基)苯 ((Phenylsulfinyl)benzene)

(苯亚磺酰基)苯 ((benzenesulfinyl)benzene) — (IUPAC-2013 建议)

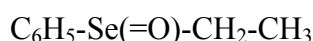
二苯基亚磺 (Diphenyl sulfoxide)



1-(乙基亚磺酰基)丁烷 (1-(Ethylsulfinyl)butane)

1-(乙亚磺酰基)丁烷 (1-(Ethanesulfinyl)butane) — (IUPAC-2013 建议)

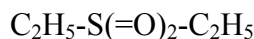
丁基乙基亚磺 (Butyl ethyl sulfoxide)



(乙基亚硒酰基)苯 ((Ethylseleninyl)benzene)

(乙亚硒酰基)苯 ((Ethaneseleninyl)benzene) — (IUPAC-2013 建议)

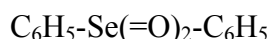
乙基苯基亚硒 (Ethyl phenyl selenoxide)



(乙基磺酰基)乙烷 ((Ethylsulfonyl)ethane)

(乙磺酰基)乙烷 ((Ethanesulfonyl)ethane) — (IUPAC-2013 建议)

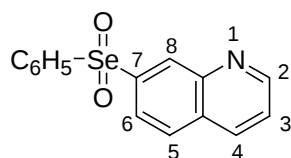
二乙基磺 (Diethyl sulfone)



(苯基亚硒酰基)苯 ((Phenylselenonyl)benzene)

(苯亚硒酰基)苯 ((Benzeneselenonyl)benzene) — (IUPAC-2013 建议)

二苯基亚硒 (Diphenyl selenone)



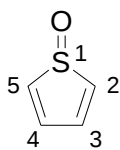
7-(苯基亚硒酰基)喹啉 (7-(Phenylselenonyl)quinoline)

7-(苯亚硒酰基)喹啉 (7-(Benzeneselenonyl)quinoline) — (IUPAC-2004 建议)

苯基(喹啉-7-基)亚硒 (Phenyl 7-quinolyl selenone)

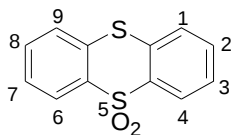
当基团 $>\text{SO}$ 或 $>\text{SO}_2$ 是环体系的一部分时，可用类别名 "氧化物" 来表达氧原子，用加合法命名将其加在杂环名称的后面，或者用取代法命名将前缀 "氧亚基- (oxo-)" 加在杂环名称的前面，杂环中的硫原子用 λ^4 或 λ^6 来标明。

例:



噻吩 1-氧化物 (Thiophene 1-oxide)

1-氧亚基-1 λ^4 -噻吩 (1-Oxo-1 λ^4 -thiophene)



二硫杂蒽 5,5-二氧化物 (Thianthrene 5,5-dioxide)

5,5-二氧化亚基-5 λ^6 -二硫杂蒽 (5,5-Dioxo-5 λ^6 -thianthrene)

6.4. 醛, 酮及其衍生物和类似物 (aldehydes, ketones, their derivatives and analogues)

6.4.1. 醛, 硫醛及其类似物 (aldehydes, thioaldehydes, and their analogues)

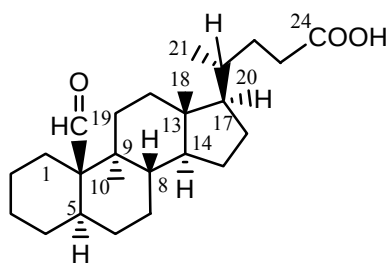
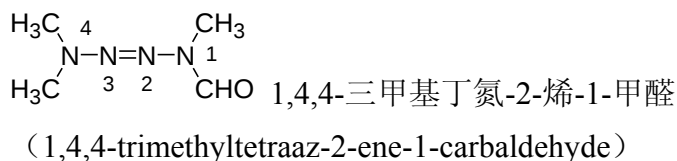
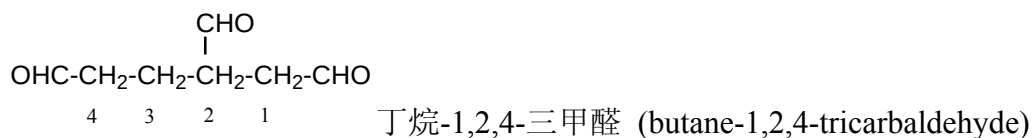
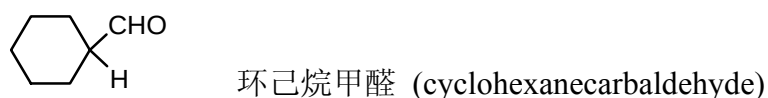
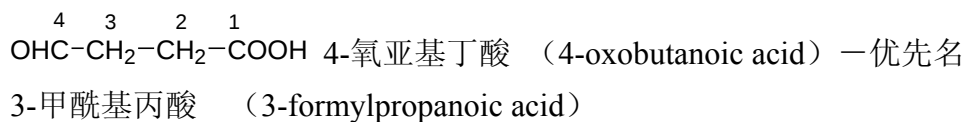
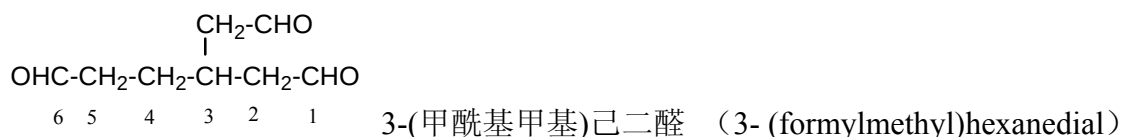
类别术语‘醛’ (aldehyde) 系指有-CHO 基团连接到一个碳原子上的化合物。相应于有俗名的羧酸 (见下 6.5.1 节, 表 6-5-2) 的醛类命名时, 将后缀‘酸’改‘醛’即可, (英文则将后缀‘-ic acid’或‘-oic acid’改成成‘-aldehyde’)。无环单或二元醛的命名是将同数碳原子烃的名称后缀变成‘醛’ (al) 或‘二醛’ (dial)。其它醛的命名为母体氢化物加后缀‘甲醛’ (carbaldehyde)。当存在有其它优先作为主要特性基团的基团时, 醛基则是以前缀‘甲酰基’ (formyl) 来表示。在天然产物命名中, 表示一个 CH₃ 基团转换成醛是使用该甲基位次加前缀‘氧亚基-’ (oxo-)。IUPAC-2013 中将醛的命名方法放在酰氨、酰亚胺、酰肼和腈之后进行介绍, 以命名方式而言有其可取之处, 但一般以讨论特性基团 (官能团) 性能和反应为主的有机化学中还是将醛和酮归在一起, 本建议也采用这样的编排。

例:

CH₃-CHO 乙醛 (acetaldehyde)

CH₃-CH₂-CH₂-CH₂-CHO 戊醛 (pentanal)

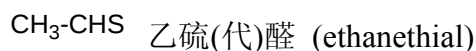
OHC-[CH₂]₄-CHO 己二醛 (hexanedial)



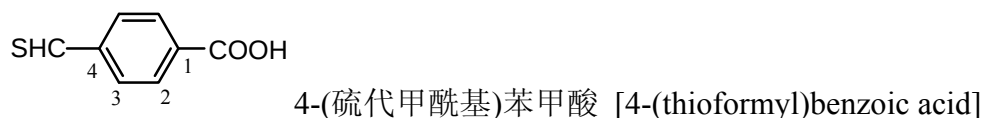
19-氧亚基-5α-胆甾-24-酸 (19-oxo-5α-cholan-oic acid)

醛的硫属类似物命名是使用后缀‘硫醛’(-thial), ‘硒醛’(-selenal), ‘甲硫(代)醛’ (carbothialdehyde), ‘甲硒(代)醛’ (carbosenaldehyde) 以及前缀‘硫代甲酰基’ (thioformyl-), ‘硫亚基’ (thioxo-)等。IUPAC 不推荐使用前缀‘硫代’ (thio-), ‘硒代’ (seleno-), 以及‘碲代’ (telluro-) 来表达俗名醛中氧的置换。

例:

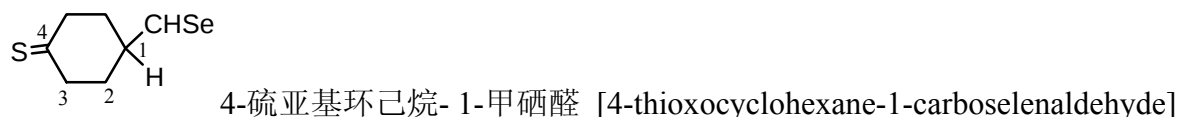
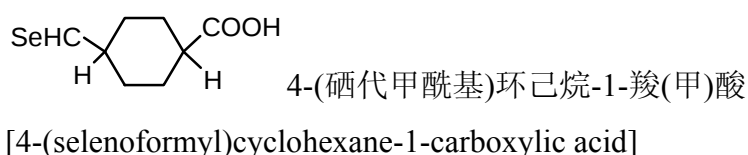


$\text{CH}_3\text{-(CH}_2\text{)}_4\text{-CHSe}$ 己硒(代)醛 (hexaneselenal)



$\text{SHC-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CHS}$ 戊二硫醛 (pentanedithial)

$\text{C}_6\text{H}_5\text{CHS}$ 苯甲硫醛 (benzenecarbothialdehyde)

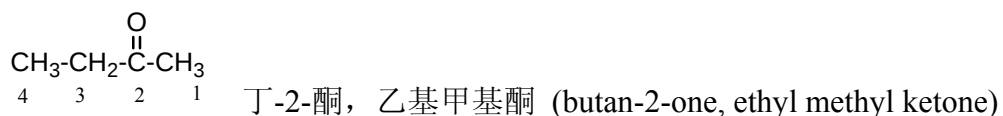


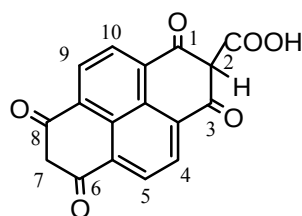
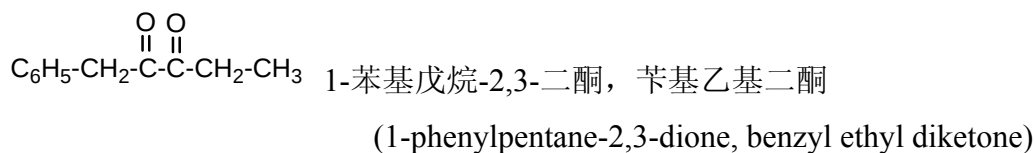
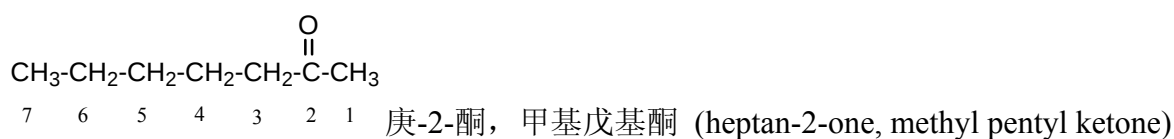
6.4.2. 酮，硫酮及其类似物 (ketones, thioketones, and their analogues)

6.4.2.1. 酮 (ketones).

类别术语‘酮’ (ketone) 系指有羰基 $>\text{C}=\text{O}$ 连接到二个碳原子上的化合物。酮的命名是加后缀‘酮’ (-one) 或‘二酮’ (-dione)到母体氢化物名称后。当存在有其它优先作为主要特性基团的基团时，酮基则是以前缀‘氧亚基-’ (oxo-)来表示。单酮和邻二酮等采用官能团类别定名法命名时，将二个连接到羰基上的基团名称作为前缀，依英文字母顺序前后排列，再以类别名‘酮’ (ketone)，‘二酮’ (diketone)等结尾。中文‘酮’字既作后缀，也作类别名，使用时需注意二者含义不同，前者酮字的含义中不包含碳，仅指结构中的‘ $=\text{O}$ ’；而后者则含一个碳和一个氧，指结构中的‘ $>\text{C}=\text{O}$ ’。

例：

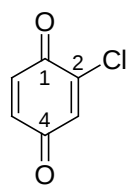




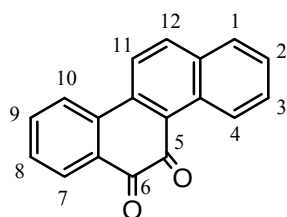
1,3,6,8-四氧亚基-1,2,3,6,7,8-六氢茈-2-(羧)甲酸
(1,3,6,8-tetraoxo-1,2,3,6,7,8- hexahydropyrene- 2-carboxylic acid)

具有最大非累积双键数的环状母体氢化物 (熯环—mancude ring system), 其中有二个 $-\text{CH}=\text{}$ 基团转变成 $>\text{C}=\text{O}$ 基团, 同时双键重排而成醌式结构的二酮类也可采用加后缀 ‘-醌’ (-quinone) 到芳香母体氢化物名称后的方式来命名。由熯环衍生的一般酮类化合物可采用加额外氢的方式进行命名。

例:

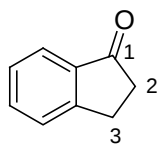


2-氯环己-2,5-二烯-1,4-二酮 (2-chlorocyclohexa-2,5-diene-1,4-dione)
2-氯-1,4-苯醌 (2-chloro-1,4-benzoquinone)

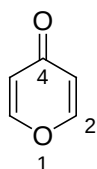


(⁺⁺屈)茈-5,6-醌, (⁺⁺屈)茈-5,6-二酮 (chrysene-5,6-quinone,

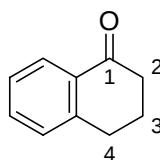
chrysene-5,6-dione)



2,3-二氢-1*H*-茛-1-酮; (茛烷-1-酮) (2,3-dihydro-1*H*-inden-1-one; (indan-1-one))



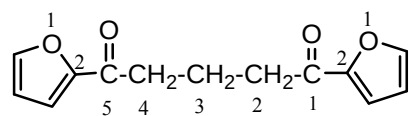
4*H*-吡喃-4-酮; (吡喃-4-酮) (4*H*-pyran-4-one; (pyran-4-one))



3,4-二氢萘-1(2*H*)-酮; (1,2,3,4-四氢萘-1-酮)
(3,4-dihydronaphthalen-1(2*H*)-one; (1,2,3,4-tetrahydronaphthalen-1-one))

环状母体氢化物的酰基衍生物命名可将环状母体氢化物作为取代基前缀置于无环酮名称前。

例:



1,5-二(呋喃-2-基)戊-1,5-二酮

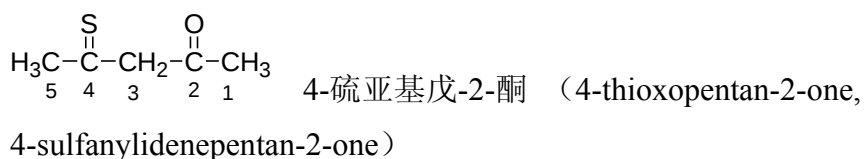
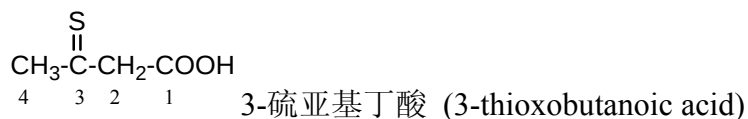
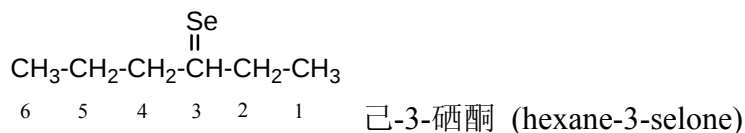
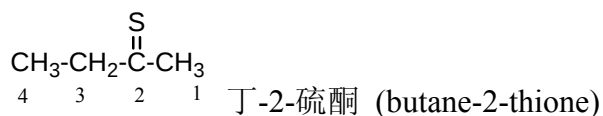
[1,5-di(furyl)pentane-1,5-dione]

英文中苯或萘的酰基衍生物也可以酰基名加后缀‘-ophenone’或 ‘-onaphthone’ 来命名, IUPAC 仅建议作为俗名保留 acetophenone, propiophenone, 以及 benzophenone 三词, 但中文中建议不作保留, 上述三词仍按常规命名: 苯乙酮或苯基甲基酮; 苯丙酮或苯基乙基酮; 二苯酮。

6.4.2.2. 酮类硫属类似物(chalcogen analogues of ketones) 这些类似物命名时可采用诸如 ‘硫酮’ (-thione), ‘硒酮’ (-selone) 为后缀, 或者 ‘硫亚基’ (thioxo-, sulfanylidene-) ‘硒亚基’ (selenoxo-, selanulidene-) 类作为前缀。英文中 IUPAC 不推荐采用硫代(thio-)或硒代(seleno-)作为前缀加在以俗名命名的酮(如丙酮 acetone)前以表示硫属原子置换

酮的氧原子，中文也然。

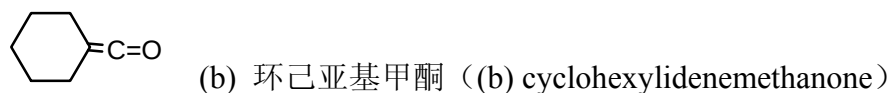
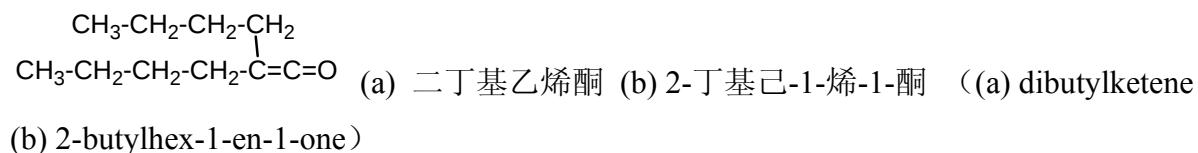
例：



6.4.3. 烯酮 (Ketenes)

化合物 $\text{CH}_2=\text{C}=\text{O}$ 是一官能性母体化合物，称‘烯酮’。其衍生物的命名可采用 (a) 将所有取代基作为前缀，以乙烯酮 (ketene) 为词尾； (b) 使用命名酮的原则方法。

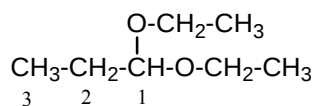
例：



6.4.4. 缩醛，半缩醛，酰基缩醛，及其类似物 (acetals, hemiacetals, acylals, and their analogues)

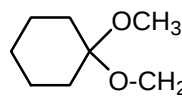
6.4.4.1. 缩醛 (Acetals) 通用结构为 $RR'C(O-R'')(O-R''')$ 的化合物，其中 R 及 R' 可能为氢，但 R'' 和 R''' 不能是氢，一般地称其为‘缩醛’ (acetals)。
‘缩酮’ (ketals) 是缩醛的亚类，其 R 及 R' 都不是氢。缩醛也可作为一个适当母体氢化物或官能性母体化合物‘烷氧基’ (alkoxyl-)，‘芳氧基’ (aryloxy-) 等取代基的衍生物来进行命名。此外，按照官能团类别定名法命名则可在相应的醛或酮名称后依次加上 O-取代基名和‘缩醛’ (acetals) 或‘缩酮’ (ketals)。环状缩醛和缩酮可按杂环命名或按照官能团类别定名法命名，在相应的醛或酮名称后依次加上 O, O-取代基名和‘缩醛’ (acetals) 或‘缩酮’ (ketals)。

例：



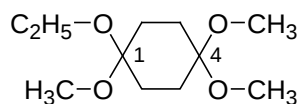
1,1-二乙氧基丙烷，丙醛二乙基缩醛

(1,1-diethoxypropane, propanal diethyl acetal, propionaldehyde diethyl acetal)

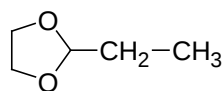


1-乙氧基-1-甲氧基环己烷，环己酮乙基甲基缩酮

(1-ethoxy-1-methoxycyclohexane, cyclohexanone ethyl methyl ketal)

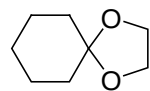


1-乙氧基-1,4,4-三甲氧基环己烷，环己烷-1,4-二酮-1-乙基-1,4,4-三甲基二缩酮 (1-ethoxy-1,4,4-trimethoxycyclohexane, cyclohexane-1,4-dione 1-ethyl 1,4,4-trimethyl diketal)



2-乙基-1,3-二氧(杂)戊环烷，丙醛乙叉基缩醛 (2-ethyl-1,3-dioxolane,

propanal ethylene acetal)



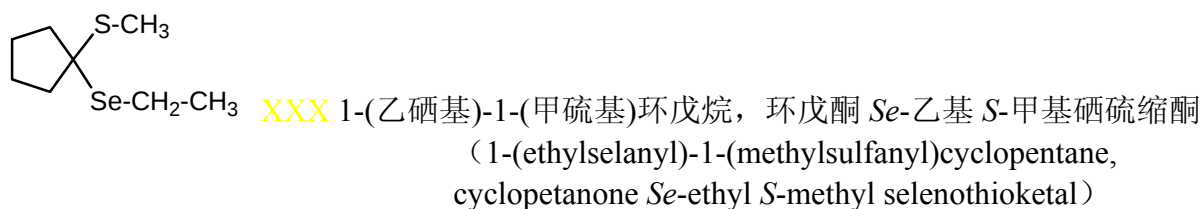
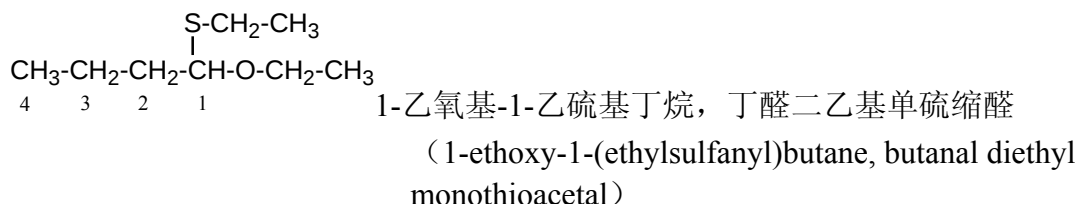
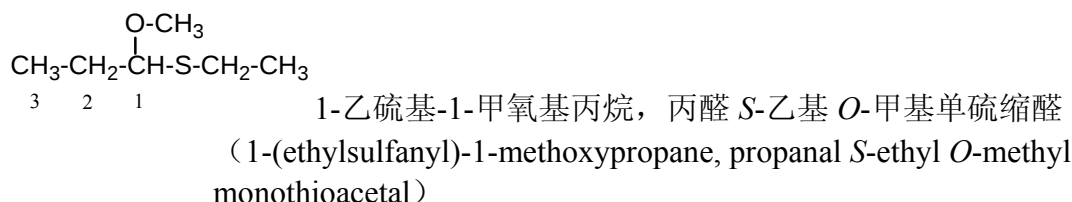
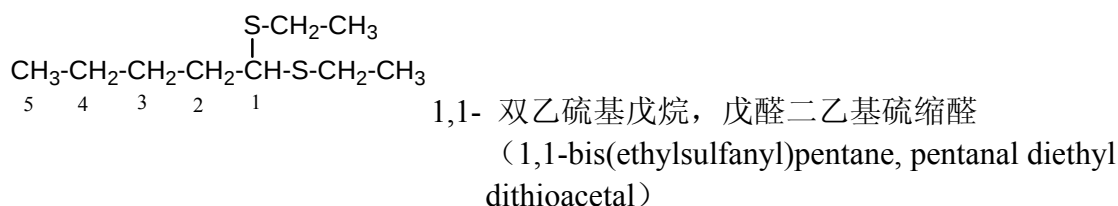
1,4-二氧杂螺[4.5]癸烷，环己酮乙叉基缩酮 (1,4-dioxaspiro[4.5]decane,

cyclohexanone ethylene ketal)

通用结构为 $RR'C(S-R'')(S-R''')$ 或 $RR'C(O-R'')(S-R''')$ 的缩醛和缩酮硫类似物，通常各自被称为‘二硫缩醛’ (dithioacetals) 或‘单硫缩醛’ (monothioacetals)。它们也可

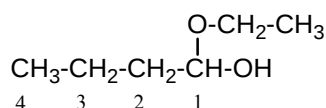
替换命名为一母体氢化物带‘烷硫基’、‘芳硫基’、‘烷氧基’、‘芳氧基’等取代基的衍生物。它们也能如同缩醛那样按照官能团类别定名法命名（见上）。结构中基团与硫属元素的连接情况可用英文大写斜体元素符号来标注。硒和碲以及混合的类似物可与硫系类似物同样方法处理，一般说来它们是‘单硒缩醛’ (monoselenoacetals)，‘二碲缩醛’ (ditelluroacetals)，‘硒碲缩醛’ (selenothioacetal)等，此外也能按照取代法使用诸如‘烷硒基’ (alkylselanyl)，‘芳碲基’ (aryltellanyl)等前缀来命名。

例：

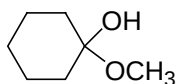


6.4.4.2. 半缩醛 (Hemiacetals) 通用结构为 $\text{RR}'\text{C}(\text{OH})(\text{O-R}'')$ 的化合物通常被称为‘半缩醛’。半缩醛也能按取代法命名为一个适当羟基母体化合物（如醇）带有诸如‘烷氧基’，‘芳氧基’等取代基的衍生物，此外也可按照官能团类别定名法使用分类名称‘半缩醛’象‘缩醛’那样进行命名。由酮衍生的半缩醛使用其亚类的分类名称‘半缩酮’ (hemiketal)。

例：



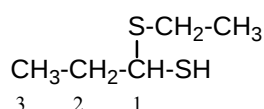
1-乙氧基丁-1-醇 (1-ethoxybutan-1-ol)
丁醛乙基半缩醛 (butanal ethyl hemiacetal)



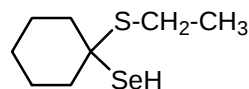
1-甲氧基环己-1-醇 (1-methoxycyclohexan-1-ol)
环己酮甲基半缩酮 (cyclohexanone methyl hemiketal)

通用结构为 $\text{RR}'\text{C}(\text{SH})(\text{S-R}'')$, $\text{RR}'\text{C}(\text{OH})(\text{S-R}'')$ 或者 $\text{RR}'\text{C}(\text{SH})(\text{O-R}'')$ 的半缩醛硫类似物通常各自被称为‘二硫半缩醛’ (dithiohemiacetals), ‘单硫半缩醛’ (monothiohemiacetals)。按取代命名法, 它们可作为一羟基母体化合物 (如醇) 或一硫醇母体化合物带有诸如‘烷硫基’ (alkylsulfanyl), ‘芳硫基’ (arylsulfanyl), ‘烷氧基’ 或者 ‘芳氧基’ 等取代基的衍生物来进行命名。它们也可按照官能团类别定名法象‘缩醛’那样进行命名。硒和碲以及混合类似物可与它们的硫类似物同样的方式对待。通常, 它们可称为‘单硒半缩醛’, ‘二碲半缩醛’, ‘硒硫半缩醛’等, 它们可取代法命名为一个适当羟基母体化合物或硫属类似物的衍生物, 使用诸如‘硫醇’ (thiol), ‘硒醇’ (selenol) 为类名, ‘烷硒基’ (alkylselanyl), ‘芳碲基’ (aryltellanyl) 等为前缀。

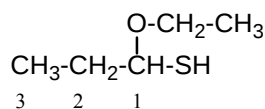
例:



1-乙硫基丙(烷)-1-硫醇 (1-(ethylsulfanyl)propane-1-thiol)
丙醛乙基二硫半缩醛 (propanal ethyl dithiohemiacetal)



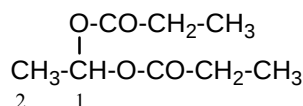
1-乙硫基环己烷-1-硒醇 (1-(ethylsulfanyl)cyclohexane-1-selenol)
环己酮 S-乙基硒硫半缩酮 (cyclohexanone S-ethyl selenothiohemiketal)



1-乙氧基丙(烷)-1-硫醇 (1-ethoxypropane-1-thiol)
丙醛 O-乙基单硫半缩醛 (propanal O-ethyl monothiohemiacetal)

6.4.4.3. 酰基缩醛 (Acylacetals) 通用结构为 $R-CH(OCO-R')_2$, $RR'-C(OCO-R'')_2$ 的化合物通常被称为‘酰基缩醛’ (acylals)。具体的化合物作为酯(esters)来命名。

例:

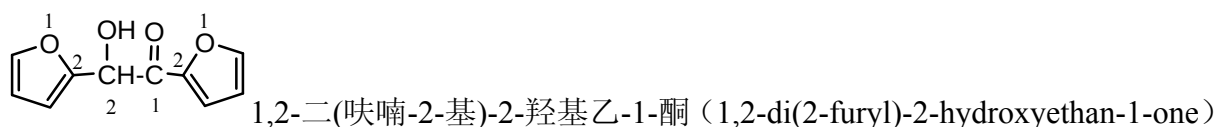
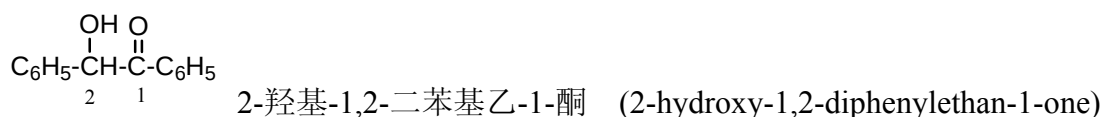
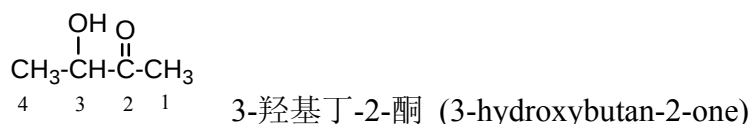


二丙酸乙-1,1-叉双酯 (俗称 二丙酸乙叉双酯)

(ethane-1,1-diyl dipropionate, (俗称 ethylidene dipropionate))

6.4.5. 偶姻 (Acyloins) α -羟基酮, $RCH(OH)-CO-R$, 其中 R 为烷基, 芳基, 或杂环, 其类别名一般称为‘偶姻’, 按取代法作为酮的衍生物来命名。

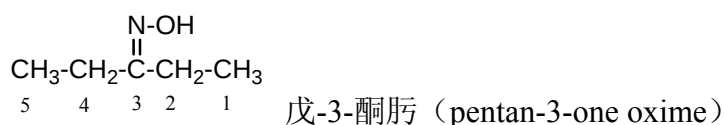
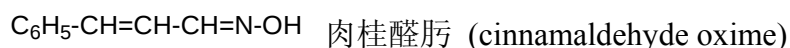
例:



6.4.6. 羰基化合物的氮衍生物 (nitrogenous derivatives of carbonyl compounds)

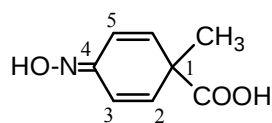
6.4.6.1. 肟 (Oximes) 有通用结构 $R-CH=N-OH$ 或 $RR'C=N-OH$ 的化合物通常被称为‘肟’, 并进一步分类各自为‘醛肟’ (aldoximes)和‘酮肟’ (ketoximes)。按照官能团类别命名原则它们可在醛 $RCHO$ 或酮 $RR'C=O$ 的名称后加类名‘肟’ (oxime)来命名; 或者按取代法命名, 将前缀‘羟氨基’ (hydroxyimino-)连接到母体氢化物或母体取代基前缀的名称前。包含 $=N-OR$ 基团的化合物可命名为 O -取代肟或者烷氧取代亚胺。IUPAC-2013 则建议将肟按取代法命名为羟胺的烃亚基衍生物 (见下第 2 例)。

例:



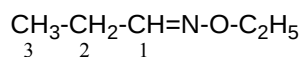
戊-3-亚基羟胺 (pentan-3-ylidenehydroxylamine)

$\text{C}_6\text{H}_5\text{-CH=N-OH}$ 苯甲醛肟 (benzaldehyde oxime)



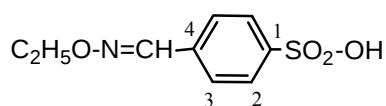
4-(羟氨基亚基)-1-甲基环己-2,5-二烯-1-羧酸

[4-(hydroxyimido)-1-methyl- cyclohexa-2,5-diene-1-carboxylic acid]



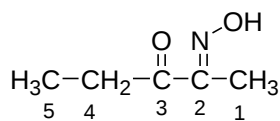
丙醛 *O*-乙基肟 (propanal *O*-ethyloxime)

N-乙氧基丙-1-亚胺 (*N*-ethoxypropan-1-imine)



4-[(乙氧氨基亚基)甲基]苯-1-磺酸

{4-[(ethoxyimino)methyl]benzene-1-sulfonic acid}



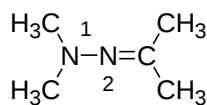
2-(羟氨基亚基)戊-3-酮 (2-(hydroximino)pentan-3-one)

戊-2,3-二酮-2-肟 (pentane-2,3-dione 2-oxime)

6.4.6.2. 腙 (Hydrazones) 有通用结构 R-CH=N-NH_2 或 RR'C=N-NH_2 的化合物通常被称为‘腙’，按照官能团类别命名原则它们可在相应醛或酮的名称后加类名‘腙’ (hydrazone)来命名，或者按取代法命名将它们作为母体氢化物乙氮烷(胂) (Diazane, Hydrozine) NH_2NH_2 的衍生物来命名。在不是主特性基团时可将前缀‘腙基’ (hydrazono-) 连接到母体氢化物或母体取代基前缀的名称前来进行命名，IUPAC-2004 则建议采用‘胂亚基’ (hydrazinylidene) 作为前缀。

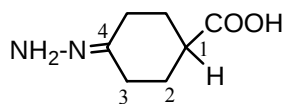
例：

$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH=N-NH}_2$ 丙醛腙 (propanal hydrazone)



丙酮二甲基腙 (acetone dimethylhydrazone)

1,1-二甲基-2-(丙-2-亚基)乙氮烷(胂) (1,1-dimethyl-2-(propan-2-ylidene)hydrazine)

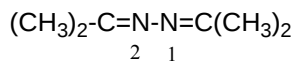


4-肼基环己烷-1-羧酸 (4-hydrazonocyclohexane-1-carboxylic acid)

4-肼亚基环己烷-1-羧酸 (4-hydrazinylidenecyclohexane-1-carboxylic acid)

6.4.6.3. 双肼 (Azines). 有通用结构 $R-CH=N-N=CHR$ 或 $RR'C=N-N=CRR'$ 的化合物通常被称为‘双肼’。按取代法命名它们可命名为乙氮烷(肼) (Diazane, Hydrozine) 的衍生物, 或者使用前缀‘双肼-’ (azino-) 来命名二个相同单元的组合, IUPAC-2004 则建议采用‘肼二亚基-’ (hydrazinediylidene-) 作为前缀。按照官能团类别命名原则它们可在相应醛或酮的名称后加类名‘双肼’ (azine) 来命名。

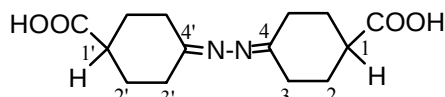
例:



1,2-二异丙亚基乙氮烷 (1,2-diisopropylidenediazane)

1,2-二异丙亚基乙氮烷(肼) (1,2-di(propan-2-ylidene)hydrazine)

丙酮双肼 (acetone azine)



4,4'-双肼二(环己烷-1-羧酸)

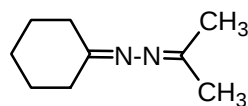
(4,4'-azinodi(cyclohexane-1-carboxylic acid))

4,4'-肼二亚基二(环己烷-1-羧酸)

(4,4'-hydrazinediylidenedi(cyclohexane-1-carboxylic acid))

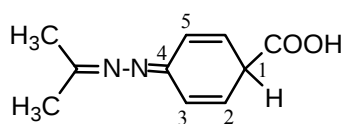
有通用结构 $R=N-N=R'$ ($R \neq R'$) 的化合物通常被称为优先羰基化合物的亚基肼 (ylidene- hydrazones) 或者使用前缀‘肼基’ (hydrazono-) 或按 IUPAC-2004 建议用‘肼亚基’ (hydrazinylidene)。

例:



环己酮异丙亚基肼 (cyclohexanone isopropylidenehydrazone)

环己酮丙-2-亚基肼 (cyclohexanone propan-2-ylidenehydrazone)



4-(异丙亚基肼基)环己-2,5-二烯-1-羧酸

(4-(isopropylidenehydrazono)cyclohexa- 2,5-diene-1-carboxylic acid)

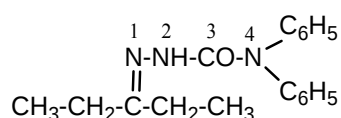
4-(丙-2-亚基肼基)环己-2,5-二烯-1-羧酸 (4-(propan-2-ylidenehydrazono)cyclohexa-2,5-diene-1-carboxylic acid)

4-(丙-2-亚基肼亚基)环己-2,5-二烯-1-羧酸 (4-(propan-2-ylidenehydrazinylidene) cyclohexa-2,5-diene-1-carboxylic acid)

6.4.6.4. 羰基化合物的其它氮衍生物 (Other nitrogenous derivatives of carbonyl compounds)

$\text{NH}_2\text{-CO-NH-N=CH-R}$ 和 $\text{NH}_2\text{-CO-NH-N=CRR'}$ 类型的‘氨基脒’ (semicarbazide) $\text{NH}_2\text{-CO-NH-NH}_2$ 衍生物可以‘氨基脒’作为官能性母体化合物进行取代法命名, 或使用前缀名‘脒氨基亚基-’ (semicarbazono-), 也可按照官能团类别命名原则在醛或酮名后加类名‘缩氨基脒’ (semicarbazone) 来命名。硫属类似物可以相同方式基于官能性母体化合物名称如‘氨基硒脒’ (selenosemicarbazide) 和前缀名如‘硫脒氨基亚基-’ (thiosemicarbazono-) 来进行命名, 或者按照官能团类别命名原则使用类名如‘缩氨基硫脒’ (thiosemicarbazone) 来命名。

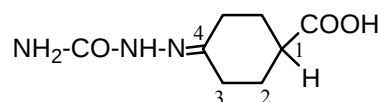
例:



1-(戊-3-亚基)-4,4-二苯基氨基脒 (1-(pentan-3-ylidene)-4,4-diphenylsemicarbazide)

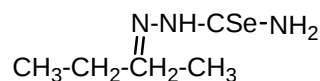
1-(1-乙基丙亚基)-4,4-二苯基氨基脒 (1-(1-ethylpropylidene)-4,4-diphenyl-semicarbazide)

戊-3-酮-4,4-二苯基缩氨基脒 (pentan-3-one 4,4-diphenylsemicarbazone)



4-脒氨基亚基环己烷-1-羧酸 (4-semicarbazonocyclohexane-1-carboxylic acid)

4-氧亚基环己烷-1-羧酸缩氨基脒 (4-oxocyclohexane-1-carboxylic acid semicarbazone)



1-(丁-2-亚基)硒代氨基脒 (1-(butan-2-ylidene)selenosemicarbazide)

1-(1-甲基丙亚基)硒代氨基脒 (1-(1-methylpropylidene)selenosemicarbazide)

丁-2-酮硒代缩氨基脒 (butan-2-one selenosemicabazone)

其余的氨基脒, 均二氨基脒 (俗称卡巴肼或卡巴脒) (carbonohydrazide)

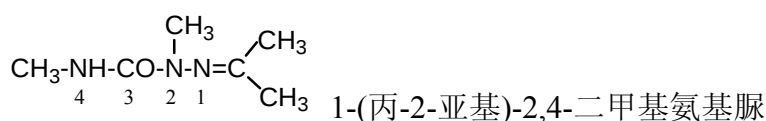
$\text{H}_2\text{N-NH-CO-NH-NH}_2$, 氨基氨基亚基脒 (俗称卡巴脒) (carbazone) HN=N-CO-NH-NH_2 的

衍生物以及它们的硫属类似物可使用这些官能性母体的名称按取代法进行命名。使用诸

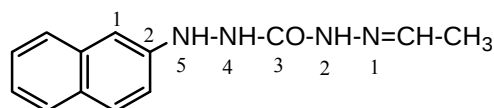
如‘氨基脒基-’ (semicarbazido-), ‘硫代均二氨基脒基-’ (thiocarbonohydrazido-), ‘氨基氨亚基脒基-’ (carbazono-) 等名称为前缀。这些前缀仅表示由相应的官能性母体化合物上从位次‘1’失去一个氢原子而形成的取代基。IUPAC-2004 建议

$$\begin{array}{ccccccc} 5 & 4 & 3 & 2 & 1 & & 5 & 4 & 3 & 2 & 1 \\ \text{H}_2\text{N}-\text{NH}-\text{CO}-\text{NH}-\text{NH}_2 & \text{命名为脒甲酰脒 (hydrazinecarbohydrazide),} & \text{HN}=\text{N}-\text{CO}-\text{NH}-\text{NH}_2 & \text{命名为乙氮烯甲酰脒 (diazene-carbohydrazide),} & \text{相应的前缀名分别为} & 2\text{-脒羰脒-1-基} & (2\text{-hydrazinecarbonylhydrazin-1-yl}) & \text{和} & 2\text{-乙氮烯羰脒-1-基} & (2\text{-diazene-carbonylhydrazin-1-yl (or diazene-carbonylhydrazido)}) \end{array}$$

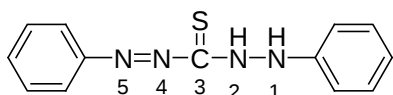
例:



1-(丙-2-亚基)-2,4-二甲基氨基脒
(1-(propan-2-ylidene)-2,4-dimethylsemicarbazide)
1-异丙亚基-2,4-二甲基氨基脒 (1-isopropylidene-2,4-dimethylsemicarbazide)
丙酮-2,4-二甲基缩氨基脒 (Acetone 2,4-dimethylsemicarbazone)



1-乙亚基-5-(萘-2-基)均二氨基脒 (1-ethylidene-5-(2-naphthyl)carbonohydrazide)
1-乙亚基-5-(萘-2-基)脒甲酰脒 (1-ethylidene-5-(2-naphthyl)hydrazinecarbohydrazide)



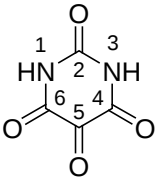
1,5-二苯基(氨基)氨亚基硫脒 (1,5-二苯基硫代卡巴腓) (1,5-diphenylthiocarbazone)
1,5-二苯基乙氮烯硫代甲酰脒 (1,5-diphenyldiazene-carbothiohydrazide)

本节以上涉及的氨基脒, 均二氨基脒等实质上均可视为脒的衍生物, 此外还有一些俗名保留的脒的衍生物, 现汇总见下表 (表 6-4-1)。

表 6-4-1. 采用俗名命名的多氮母体结构 (脒衍生物)

无环母体结构	
类型 1—不限制取代	
$\begin{array}{ccccccc} & \text{O} & & \text{H} & & & \\ & & & & & & \\ \text{H}_2\text{N}-\text{C}-\text{N}-\text{COOH} \\ 4 & 3 & 2 & 1 \end{array}$	$\begin{array}{ccccccc} & \text{NH} & & \text{H} & & \text{NH} & \\ & & & & & & \\ \text{H}_2\text{N}-\text{C}-\text{N}-\text{C}-\text{NH}_2 \\ 5 & 4 & 3 & 2 & 1 \end{array}$
脒基甲酸 (Allophanic acid)	双胍 (Biguanide)

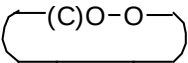
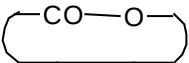
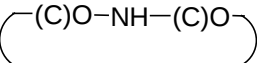
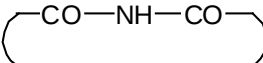
$\begin{array}{c} \text{O} \quad \text{H} \quad \text{O} \\ \parallel \quad \quad \parallel \\ \text{H}_2\text{N}-\text{C}-\text{N}-\text{C}-\text{NH}_2 \\ 5 \quad 4 \quad 3 \quad 2 \quad 1 \end{array}$ 双脲，缩二脲（Biuret）	$\begin{array}{c} \text{O} \quad \text{H} \\ \parallel \quad \\ \text{HN}=\text{N}-\text{C}-\text{N}-\text{NH}_2 \\ 5 \quad 4 \quad 3 \quad 2 \quad 1 \end{array}$ 氨基氨基脲（Carbazone） （俗称卡巴腓）—不推荐
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{HN}=\text{N}-\text{C}-\text{N}=\text{NH} \\ 5 \quad 4 \quad 3 \quad 2 \quad 1 \end{array}$ 均二氨基亚基脲（Carbadiazone）	$\text{HN}=\text{C}=\text{NH}$ 碳二亚胺（Carbadiimide）
$\begin{array}{c} \text{O} \quad \text{H} \quad \text{H} \\ \parallel \quad \quad \\ \text{H}_2\text{N}-\text{N}-\text{C}-\text{N}-\text{NH}_2 \\ 5 \quad 4 \quad 3 \quad 2 \quad 1 \end{array}$ 均二氨基脲（Carbonohydrazide） （俗称卡巴肼或卡巴脲）—不推荐	$\begin{array}{c} 5 \quad 4 \quad 3 \quad 2 \quad 1 \\ \text{H}_2\text{N}-\text{N}=\text{C}-\text{N}=\text{NH} \\ \quad \quad \quad \\ \quad \quad \quad \text{H} \end{array}$ 甲腓(za)（Formazan） （曾用名甲月潜）
$\begin{array}{c} \text{NH} \\ \parallel \\ \text{H}_2\text{N}-\text{C}-\text{NH}_2 \\ 3 \quad 2 \quad 1 \end{array}$ 胍（Guanidine）	$\begin{array}{c} \text{O} \quad \text{H} \quad \text{H}_2 \\ \parallel \quad \quad \\ \text{H}_2\text{N}-\text{C}-\text{N}-\text{C}-\text{COOH} \\ 5 \quad 4 \quad 3 \quad 2 \quad 1 \end{array}$ 脲基乙酸（Hydantoic acid）
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{H}_2\text{N}-\text{C}-\text{NH}_2 \\ 3 \quad 2 \quad 1 \end{array}$ 脲（Urea）	$\begin{array}{c} \text{OH} \\ \\ \text{HN}=\text{C}-\text{NH}_2 \\ 3 \quad 2 \quad 1 \end{array}$ 异脲（Isourea）
$\begin{array}{c} \text{NH} \quad \text{NH} \\ \parallel \quad \parallel \\ \text{H}_2\text{N}-\left[\text{C}-\text{N} \right]_n-\text{C}-\text{NH}_2 \\ 2n+3 \quad \quad \quad 2 \quad 1 \end{array}$ n=2 缩三胍（Triguanide） n=3 缩四胍（Tetraguanide）	$\begin{array}{c} \text{O} \quad \text{H} \quad \text{NH} \\ \parallel \quad \quad \parallel \\ \text{H}_2\text{N}-\left[\text{C}-\text{N} \right]_n-\text{C}-\text{NH}_2 \\ 2n+3 \quad \quad \quad n \quad 2 \quad 1 \end{array}$ n=2 缩三脲（Triuret） n=3 缩四脲（Tetrauret）
$\begin{array}{c} \text{O} \quad \text{H} \\ \parallel \quad \\ \text{H}_2\text{N}-\text{C}-\text{N}-\text{NH}_2 \\ 4 \quad 3 \quad 2 \quad 1 \end{array}$ 氨基脲（Semicarbazide）	
成环母体结构	
类型 1—不限制取代	
$\begin{array}{c} \text{H} \\ 1 \quad \text{N} \quad 2 \\ \quad \parallel \\ 5 \quad \text{C} \quad 3 \\ \quad \parallel \\ 4 \quad \text{C} \quad \text{NH} \\ \parallel \quad \\ \text{O} \quad 3 \end{array}$ 乙内酰脲（Hydantoin）	$\begin{array}{c} \text{H} \\ 1 \quad \text{N} \quad 2 \\ \quad \parallel \\ 5 \quad \text{C} \quad 3 \\ \quad \parallel \\ 4 \quad \text{C} \quad \text{NH} \\ \parallel \quad \\ \text{O} \quad \text{S} \end{array}$ 乙内酰硫脲（Rhodanine）
$\begin{array}{c} \text{O} \\ 1 \quad \parallel \quad 3 \\ \text{HN} \quad 2 \quad \text{NH} \\ \quad \parallel \quad \\ 6 \quad \text{C} \quad 4 \\ \parallel \quad \quad \parallel \\ \text{O} \quad 5 \quad \text{O} \end{array}$ 丙二酰脲（Barbituric acid） 巴比妥酸	

类型 3—无取代	
 四氧嘧啶 (Alloxane) (俗称阿脉) —不推荐	

6.5. 酸和相关的特性基团 (Acid and related characteristic group)

羧酸及其相关的特性基团通过使用适当的后缀或词尾（见表 6-5-1）进行命名。

表 6-5-1. 羧酸，一些相关的特性基团和取代衍生物的后缀或词尾

(a)一元羧酸及其相关特性基团			
—(C)OOH	-酸 (-oic acid)	—COOH	-(羧)甲 ^a 酸 (-carboxylic acid)
—(C)OOR	-酸R酯 (R ...oate)	—COOR	-(羧)甲 ^a 酸R酯 (R ...carboxylate)
	-内酯 (-olactone)		-碳内酯 (-carbolactone)
—(C)O—X	-酰卤 (-oyl halide)	—CO—X	-(羧)甲 ^a 酰卤 (-carbonyl halide)
[—(C)O] ₂ O	-酸酐 (-oic anhydride)	[—CO] ₂ O	-甲酸酐 (-carboxylic anhydride)
—(C)O—NH ₂	-酰胺 (-amide)	—CO—NH ₂	-甲酰胺 (-carboxamide)
—(C)≡N	-腈 (-nitrile)	—C≡N	-甲腈 (-carbonitrile)
(b) 二元羧酸及其相关特性基团、取代基			
HOO(C) ... (C)OOH	-二酸 (-dioic acid)	HOOC ... COOH	-二甲酸 (-dicarboxylic acid)
	-酰亚胺 ^b (-imide ^b)		-二(甲)酰亚胺 -dicarboximide
HOO(C) ... (C)O—NH ₂	-酰胺酸 ^b (-amic acid ^b)		
HOO(C) ... (C)O—NH—C ₆ H ₅	-酰苯胺酸 ^b (-anilic acid ^b)		
HOO(C) ... (C)HO	-醛酸 ^b (-aldehydic acid ^b)		

^a 在不致引起混淆时，羧字可省略。 ^b 此类词尾仅适用于以俗名命名的二元酸，如琥珀酰亚胺。

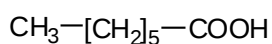
羧基中的羰基氧原子或羟基被其它原子或官能团置换后词形变化见表 6-5-3。有机硫酸和磷酸以及它们置换修饰后的词形变化分别见表 6-5-4, 6-5-5。

6.5.1 羧酸

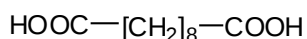
6.5.1.1 简单（未取代）的链状一元酸、二元酸

链状烃末端的甲基被羧基取代，命名时将相应链状烃名称中‘烷’替换为‘酸’或‘二酸’即可。英文命名时在链状烃名称后面加上相应的后缀‘-oic acid’或‘-dioic acid’，若链状烃名称尾字母为元音字母‘e’，则省略。

例：



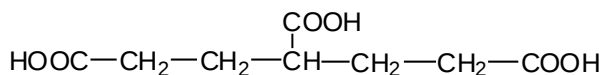
庚酸（Heptanoic acid）



癸二酸（Decanedioic acid）

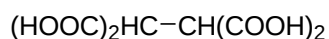
若某直链烃直接与两个以上羧基相连，在命名时可看作母体氢化物为羧基所取代，采用诸如‘-三甲酸’（‘-tricarboxylic acid’）等后缀来表示。

例：



戊(烷)-1.3.5-三甲酸（Pentane-1.3.5-tricarboxylic acid）

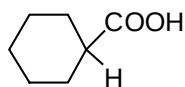
(不能命名为：4-羧基庚二酸 4-Carboxyheptanedioic acid)



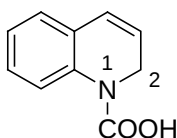
乙烷-1,1,2,2-四甲酸（Ethane-1,1,2,2-tetracarboxylic acid）

其它羧基连在环状母体氢化物或杂原子链上的羧酸命名是在相应母体氢化物名称的后面直接加后缀‘-甲酸（-carboxylic acid）’。

例：



环己(烷)甲酸（Cyclohexanecarboxylic acid）



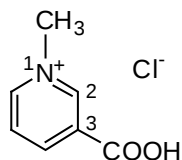
喹啉-1(2*H*)-甲酸 (Quinoline-1(2*H*)-carboxylic acid)

$\text{H}_3\text{Si}-\text{SiH}_2-\text{COOH}$

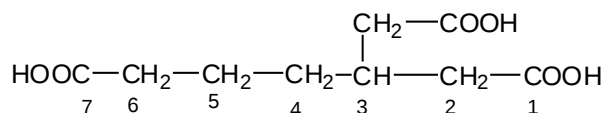
二硅烷甲酸 (Disilane-carboxylic acid)

当存在作为后缀优先级别更高的基团时，或在后缀中不能描述出所有的羧基时，可以用前缀‘羧基- (carboxy-)’进行命名。

例：



3-羧基-1-甲基吡啶氯化盐 (3-Carboxy-1-methylpyridinium chloride)



3-(羧甲基)庚二酸 3-(Carboxymethyl)heptanedioic acid

将羧酸化合物羧基中的羟基去掉后，得到单价或二价的酰基，将原羧酸名的后缀‘酸’改为‘酰基’即可为其名称。在英文中若原羧酸名称以词尾‘-oic acid’或‘ic acid’结尾，则将原羧酸名称的词尾‘-oic acid’或‘ic acid’分别替换为‘-oyl’或‘yl’即可得到该酰基的名称。

例：

$\text{CH}_3-[\text{CH}_2]_5-\text{CO}-$

庚酰（基） (Heptanoyl)

$\text{CH}_3-\text{CO}-$

乙酰（基） (Acetyl)

$-\text{OC}-[\text{CH}_2]_8-\text{CO}-$

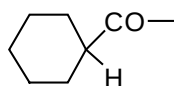
癸二酰（基） (Decanedioyl)

$-\text{OC}-\text{CH}_2-\text{CO}-$

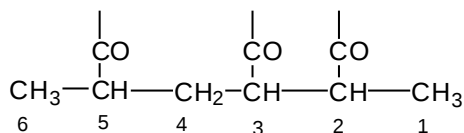
丙二酰（基） (Malonyl)

若原羧酸名称以‘-甲酸(-carboxylic acid)’结尾，则将其替换为‘-甲酰基(-carbonyl)’即可得到该酰基化合物的名称。

例：



环己烷甲酰（基）（Cyclohexanecarbonyl）

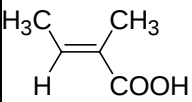
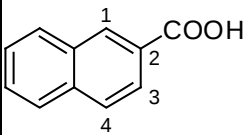
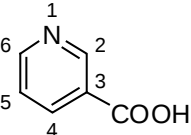
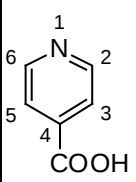
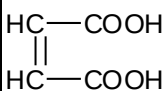
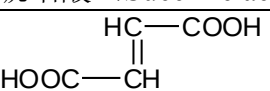


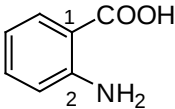
己烷-2,3,5-三甲酰（基）（Hexane-2,3,5-tricarbonyl）

一些羧酸传统上使用的俗名仍予保留，其中部份仅英文使用俗名，中文则仍使用系统命名，见下表6-5-2。

表6-5-2. 采用俗名命名的羧酸和取代羧酸

(a) 无取代母体结构	
类型 1—不限制取代	
$\text{CH}_3\text{—COOH}$ 醋酸（乙酸）*（Acetic acid）	$\text{C}_6\text{H}_5\text{—COOH}$ （苯甲酸）（Benzoic acid）
 糠酸（Furoic acid）（图示 2-位异构体）	 酞酸##（邻苯二甲酸）（Phthalic acid）
 异酞酸##（间苯二甲酸）（Isophthalic acid）	 （对苯二甲酸）（Terephthalic acid）
类型 3—无取代#	
H—COOH 蚁酸(甲酸)（Formic acid）	$\text{CH}_3\text{—CH}_2\text{—COOH}$ （丙酸）（Propionic acid）
$\text{H}_2\text{C=CH—COOH}$ （丙烯酸）（Acrylic acid）	$\text{HC}\equiv\text{C—COOH}$ （丙炔酸）（Propiolic acid**）
$\text{H}_2\text{C=C(CH}_3\text{)—COOH}$ （2-甲基丙烯酸）（Methacrylic acid）	$\text{CH}_3\text{—[CH}_2\text{]}_2\text{—COOH}$ （丁酸）（Butyric acid）
$(\text{CH}_3)_2\text{CH—COOH}$ （异丁酸）（Isobutyric acid**）	 巴豆酸（Crotonic acid）

 惕各酸## ((E)-2-甲基丁-2-烯酸) (Tiglic acid)	$\text{C}_6\text{H}_5-\text{CH}=\text{CH}-\text{COOH}$ 肉桂酸 (Cinnamic acid)
 (萘甲酸) (Naphthoic acid) (图示 2-位异构体)	 烟酸 (Nicotinic acid)
 异烟酸 (Isonicotinic acid)	$\text{HOOC}-\text{COOH}$ 草酸 (Oxalic acid)
$\text{HOOC}-\text{CH}_2-\text{COOH}$ (丙二酸) (Malonic acid)	$\text{HOOC}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{COOH}$ 琥珀酸 (Succinic acid)
 马来酸## (顺丁烯二酸) (Maleic acid)	 延胡索酸, 富马酸## (反丁烯二酸) (Fumaric acid)
$\text{HOOC}-[\text{CH}_2]_3-\text{COOH}$ (戊二酸) (Glutaric acid)	$\text{HOOC}-[\text{CH}_2]_4-\text{COOH}$ (己二酸) (Adipic acid)
$\text{CH}_3-[\text{CH}_2]_{10}-\text{COOH}$ 月桂酸 (十二酸) (Lauric acid)	$\text{CH}_3-[\text{CH}_2]_{12}-\text{COOH}$ 肉豆蔻酸 (十四酸) (Myristic acid)
$\text{CH}_3-[\text{CH}_2]_{14}-\text{COOH}$ 棕榈酸 (十六酸) (Palmitic acid)	$\text{CH}_3-[\text{CH}_2]_{16}-\text{COOH}$ 硬脂酸(十八酸) (Stearic acid)
$\text{CH}_3-[\text{CH}_2]_{18}-\text{COOH}$ 花生酸 (arachidic acid)	$\text{CH}_3-[\text{CH}_2]_{20}-\text{COOH}$ 山萘酸 (behenic acid)
$\text{CH}_3-[\text{CH}_2]_{24}-\text{COOH}$ 腊酸 (cerotic acid)	$\text{CH}_3-[\text{CH}_2]_{29}-\text{COOH}$ 蜂花酸 (melissic acid)
$\text{CH}_3-[\text{CH}_2]_3-\text{CH}=\text{CH}-[\text{CH}_2]_7\text{COOH}$ 肉豆蔻烯酸 (9Z-十四碳烯酸) (Myristoleic acid)	$\text{CH}_3-[\text{CH}_2]_5-\text{CH}=\text{CH}-[\text{CH}_2]_7\text{COOH}$ 棕榈烯酸 (9Z-十六碳烯酸) (palmitoleic acid)
$\text{CH}_3-[\text{CH}_2]_7-\text{CH}=\text{CH}-[\text{CH}_2]_7-\text{COOH}$ 油酸(9Z-十八碳烯酸) (Oleic acid)	$\text{CH}_3-[\text{CH}_2]_4-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}-[\text{CH}_2]_7\text{COOH}$ 亚油酸 (9Z,12Z-十八碳二烯酸) (linoleic acid)
$\text{C}_2\text{H}_5-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}-[\text{CH}_2]_7\text{COOH}$ 亚麻酸 (9Z,12Z,15Z-十八碳三烯酸) (linolenic acid)	

$\text{C}_5\text{H}_9\text{-CH=CH-CH}_2\text{-CH=CH-CH}_2\text{-CH=CH-CH}_2\text{-CH=CH-}[\text{CH}_2]_3\text{COOH}$ 花生四烯酸（5Z,8Z,11Z,14Z-二十碳四烯酸）（arachidonic acid）	
$\text{CH}_3\text{-}[\text{CH}_2]_7\text{-CH=CH-}[\text{CH}_2]_{11}\text{COOH}$ 芥酸（13Z-二十二碳烯酸）（erucic acid）	
(b) 含羟基、氧和氨基(非 α -氨基)羧酸	
类型 3—无取代#	
$\text{HO-CH}_2\text{-COOH}$ 乙醇酸(羟基乙酸)（Glycolic acid**）	$\text{CH}_3\text{-CH(OH)-COOH}$ 乳酸（Lactic acid）
$\text{HO-CH}_2\text{-CH(OH)-COOH}$ 甘油酸（Glyceric acid）	$\text{HOOC-}[\text{CH(OH)}]_2\text{-COOH}$ 酒石酸（Tartaric acid）
$\begin{array}{c} \text{CH}_2\text{-COOH} \\ \\ \text{HO-C-COOH} \\ \\ \text{CH}_2\text{-COOH} \end{array}$ 柠檬酸（Citric acid）	OHC-COOH 乙醛酸（氧亚基乙酸）（Glyoxylic acid**）
$\text{CH}_3\text{-CO-COOH}$ 丙酮酸（Pyruvic acid）	$\text{CH}_3\text{-CO-CH}_2\text{-COOH}$ （乙酰乙酸）（Acetoacetic acid**）
 氨茴酸(邻氨基苯甲酸)（Anthranilic acid**） (仅适用于 1,2-同分异构体)	$(\text{C}_6\text{H}_5)_2\text{C(OH)-COOH}$ 二苯乙醇酸（Benzilic acid**）
$\left(\text{HOOC-CH}_2\right)_2\text{N-}[\text{CH}_2]_2\text{-N(CH}_2\text{-COOH)}_2$ 乙二胺四乙酸（Ethylenediaminetetraacetic acid**）	
(c) 酰氨基酸和过氧羧酸（Amic acids and peroxy carboxylic acids）	
类型 1—不限制取代	
$\text{H}_2\text{N-COOH}$ （氨基甲酸）Carbamic acid	$\text{H}_2\text{N-CO-COOH}$ 草氨酸（Oxamic acid）
类型 3—无取代#	
HCO-OOH 过甲酸（Performic acid**）	
$\text{CH}_3\text{-CO-OOH}$ 过醋酸（Peracetic acid**）	$\text{C}_6\text{H}_5\text{-CO-OOH}$ 过苯甲酸（Perbenzoic acid**）

*括号内中文名为系统名。**IUPAC-2013 建议不再使用。

此类俗名不能用于取代衍生物的命名，但可用于酸酐，酯和盐的命名。

##中文曾用俗名，现不建议使用。

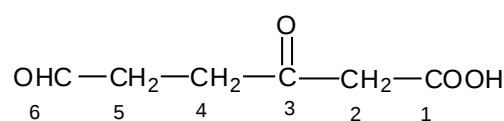
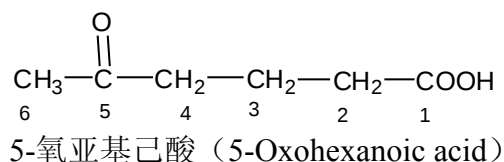
6.5.1.2 取代羧酸

6.5.1.2.1 含羟基、烷氧基、氧亚基的羧酸

一些含有羟基、烷氧基羧酸传统上使用的俗名也继续保留，其中部份仅英文使用俗

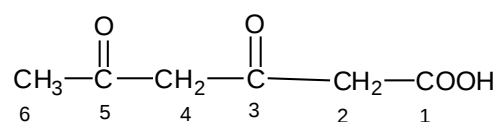
名，中文则仍使用系统命名，参见表6-5-2。连有醛基的，或在主链或母体环中包含酮基的羧酸，它们的命名则是在相应羧酸名称的前面加上前缀‘氧亚基’，‘二氧亚基’以表示取代基 $=O$ ，或以‘甲酰基’以表示取代基 $-CHO$ 。

例：

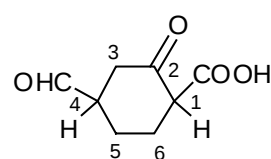


3,6-二氧亚基己酸 (3,6-Dioxohexanoic acid)

5-甲酰基-3-氧亚基戊酸 (5-Formyl-3-oxopentanoic acid)



3,5-二氧亚基己酸 (3,5-Dioxohexanoic acid)



4-甲酰基-2-氧亚基环己烷-1-甲酸 (4-Formyl-2-oxocyclohexane-1-carboxylic acid)

拥有俗名的二元酸（参见表6-5-2）中的一个羧基被醛基取代后，命名时只需将词尾‘-酸’（-ic acid）改为‘-醛酸’（-aldehydic acid）即可（参见表6-5-2 (b)）。中文不采用俗名者则可将系统名的词尾‘-二酸’或‘-二甲酸’改为‘-醛酸’或‘-甲醛甲酸’。在链末端的醛也可以前缀‘氧亚基’（oxo）或‘甲酰基’（formyl）来命名，但一般少用。

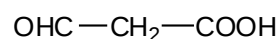
例：



琥珀醛酸 (Succinaldehydic acid)

4-氧亚基丁酸 (4-oxobutanoic acid)

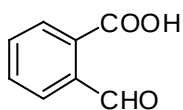
3-甲酰基丙酸 (3-formylpropanoic acid)



丙醛酸 (Malonaldehydic acid)

3-氧亚基丙酸 (3-oxopropanoic acid)

2-甲酰(基)乙酸 (2-formylacetic acid)

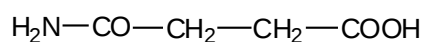


邻-苯甲醛甲酸, 邻-甲酰基苯甲酸 (Phthalaldehydic acid)

6.5.1.2.2 酰胺酸和酰苯胺酸 (Amic and anilic acids)

拥有俗名的二元酸 (参见表6-5-2(a)) 中的一个羧基被酰胺取代后, 命名时只需将后缀 ‘-酸’ 改为 ‘-酰胺酸’ 即可 (参见表6-5-2 (c))。中文不采用俗名者则可将系统名的词尾 ‘-二酸’ 或 ‘-二甲酸’ 改为 ‘-酰胺酸’ 或 ‘-甲酰胺甲酸’。此类化合物也可将酰胺作为前缀按羧酸衍生物进行取代法命名, 酰胺作为前缀时用前缀 ‘氨基羰基-’ 或 ‘甲酰胺基-’ (aminocarbonyl- 或 carbamoyl-)

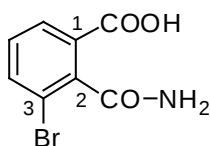
例:



琥珀酰胺酸 (Succinamic acid)

3-甲酰胺基丙酸 (3-carbamoylpropanoic acid)

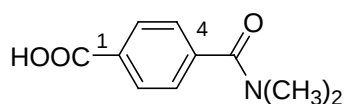
3-(氨基羰基)丙酸 (3-(aminocarbonyl)propanoic acid)



3-溴邻苯甲酰胺甲酸 (3-Bromophthalamic acid)

3-溴-2-甲酰胺基苯甲酸 (3-bromo-2-carbamoylbenzoic acid)

2-(氨基羰基)-3-溴-苯甲酸 (2-(aminocarbonyl)-3-bromo-benzoic acid)



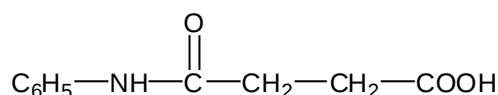
N,N-二甲基对苯甲酰胺甲酸 (*N,N*-dimethylterephthalamic acid)

4-[(二甲基氨基)羰基]苯甲酸 (4-[(dimethylamino)carbonyl]benzoic acid)

4-(二甲基甲酰胺基)苯甲酸 (4-(dimethylcarbamoyl)benzoic acid)

酰胺酸的 *N*-苯基衍生物在英文中因苯胺俗名 aniline 而得专有名称 anilic acid, 中文可相应称酰苯胺酸, 但也可按一般 *N*-取代酰胺酸方式命名为 *N*-苯基酰胺酸。

例:

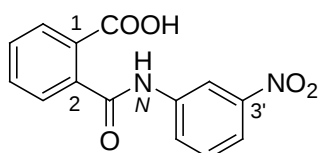


琥珀酰苯胺酸 (Succinilic acid)

N-苯基琥珀酰胺酸 (*N*-phenylsuccinamic acid)

4-(苯基甲酰胺基)丙酸 (4-(phenylcarbamoyl)propanoic acid)

4-[(苯氨基)羰基]丙酸 (4-[(phenylamino)carbonyl]propanoic acid)



N-(3-硝基苯基)邻苯甲酰胺甲酸 (*N*-(3-nitrophenyl)phthalamic acid)

2-[*N*-(3-硝基苯基)甲酰胺基]苯甲酸 (2-[*N*-(3-nitrophenyl)carbamoyl]benzoic acid)

2-[*N*-(3-硝基苯基)氨基羰基]苯甲酸 (2-[*N*-(3-nitrophenyl)aminocarbonyl]benzoic acid)

6.5.1.2.3 氨基酸 (Amino acids)

一些保留俗名的氨基酸见表6-5-2 (c)。α-氨基酸则采用特殊规则进行命名，参见第8章天然产物命名。

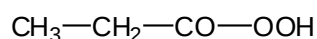
6.5.1.3 羧酸基团的修改

6.5.1.3.1 过氧酸 (Peroxy acids)

含基团 —CO—OOH 的羧酸称为过氧酸。命名时可在以酸为词尾的羧酸俗名或系统命名之前加相应的前缀‘过氧-’，‘单过氧-’或‘双过氧-’；对以甲酸为词尾的酸则将此类似前缀加在甲酸或二甲酸前。若结构中存在比过氧酸优先作为后缀的基团，则将其以‘过氧羧基-’或‘过氧羰基-’ (hydroperoxycarbonyl-) 名称作为前缀。

IUPAC-2013建议对不采用俗名的过氧酸命名时，将系统名的词尾‘-酸’ (-oic acid) 改成‘-过氧酸’ (peroxoic acid)，而不是加前缀‘过氧-’ (peroxy-)；作前缀时除用‘hydroperoxycarbonyl-’外也可，而且优先用‘carbonoperoxoyl-’，此对中文无影响；此外对链端的基团 —CO—OOH 也可分拆成基团 —OOH (过羟基, hydroperoxy) 和 $(\text{C})=\text{O}$ (氧亚基, oxo) 来进行命名。(参见例过氧己酸和单过氧己二酸)

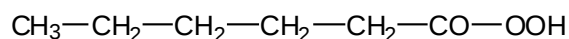
例：



过氧丙酸 (Peroxypropionic acid)

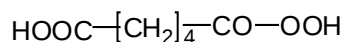


二过氧碳酸 (Diperoxycarbonic acid)



过氧己酸 (Peroxyhexanoic acid)

己过氧酸 (Hexaneperoxoic acid)

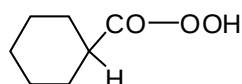


单过氧己二酸 (Monoperoxyhexanedioic acid)

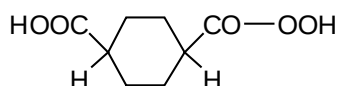
5-过氧羰基戊酸, 5-过羟羰基戊酸 (5-carbonoperoxoypentanoic acid,

5-(hydroperoxycarbonyl)pentanoic acid)

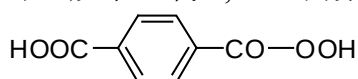
6-过羟基-6-氧亚基己酸 (6-Hydroperoxy-6-oxohexanoic acid)



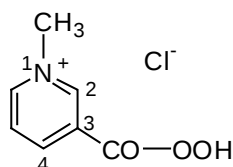
环己烷过氧甲酸 (Cyclohexaneperoxyacetic acid)



环己烷单过氧-1,4-二甲酸 (Cyclohexanemonoperoxy-1,4-dicarboxylic acid)



对苯单过氧二甲酸 (Monoperoxyterephthalic acid)



3-(过氧羰基)-1-甲基吡啶氯化盐 (3-(Hydroperoxycarbonyl)-1-methylpyridinium chloride)

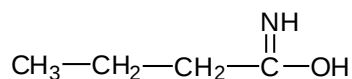
6.5.1.3.2 亚氨酸 (Imidic acid)、腙酸 (Hydrazonic acid)、羟肟酸 (hydroximic acid)

羧酸羰基中的氧原子被 ‘=NH’、‘=N-NH₂’ 或 ‘=N-OH’ 置换后所得衍生物命名时, 可将原羧酸系统命名中的后缀 ‘-酸 (-oic acid)’ 或 ‘-甲酸 (-carboxylic acid)’ 或者俗名中的词尾 ‘-酸 (-ic acid)’ 分别替换为相应的 ‘-亚氨酸 (-氨基替酸) (-imidic acid)’ 或 ‘-亚氨基甲酸 (-氨基替甲酸) (-carboximidic acid)’、‘-腙酸 (-腙基替酸) (-ohydrazonic acid)’ 或者 ‘-腙甲酸 (-腙基替甲酸) (-carbohydrazonic acid)’、‘-羟亚氨酸 (-羟氨基替酸) (-ohydroximic acid)’ 或者 ‘-羟亚氨基甲酸 (-羟氨基替甲酸) (-carbohydroximic acid)’。参见表6-5-3。

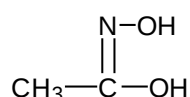
作为前缀时可分别采用C-羟基(氨基)甲基- (C-hydroxycarbonimidoyl) 对

-C(=NH)-OH; *C*-羟基(脞基)甲基- (*C*-hydroxycarbonohydrazonoyl) 对-C(=N-NH₂)-OH;
C,N-二羟基(氨亚基)甲基- (*C,N*-dihydroxycarbonimidoyl) 对-C(=N-OH)-OH进行命名。对
 碳链链端的此类基团也可以该位上二取代基来命名。

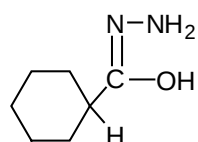
例:



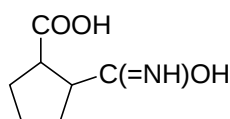
丁亚氨酸(丁氨亚基替酸) (Butanimidic acid)



乙羟亚氨酸(乙羟氨亚基替酸) (Acetohydroximic acid)

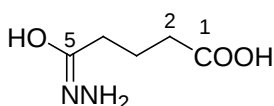


环己烷脞甲酸(环己烷脞基替甲酸) (Cyclohexanecarbohydrazonic acid)



2-(*C*-羟基(氨亚基)甲基)环戊烷-1-甲酸

(2-(*C*-hydroxycarbonimidoyl)cyclopentane-1-carboxylic acid)



4-(*C*-羟基(脞基)甲基)丁酸

(4-(*C*-hydroxycarbonohydrazonoyl)butanic acid)

5-脞基-5-羟基戊酸 (5-hydrazinylidene-5-hydroxypentanoic acid)

表6-5-3 命名羧酸置换类似物的后缀

	-OH为另一含氧基团 所置换	=O为=S和/或-OH为-SH 所置换	=O为=NH和/或-OH为 -NH-所置换
O -(C)-OH -酸 (-oic acid)	O -(C)-OOH 过氧...酸 (-peroxy...oic acid)	S -(C)-OH -硫代- <i>O</i> -酸 (-thioic <i>O</i> -acid)	NH -(C)-OH -亚氨酸 (-氨亚基替酸) (-imidic acid)
		O -(C)-SH -硫代- <i>S</i> -酸 (-thioic <i>S</i> -acid)	N-NH_2 -(C)-OH -脞酸 (-脞基替酸)

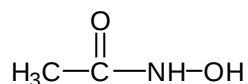
			(-hydrazonic acid)
		$\begin{array}{c} \text{S} \\ \\ -(\text{C})-\text{SH} \end{array}$ -二硫代酸 (dithioic acid)	$\begin{array}{c} \text{N}-\text{OH} \\ \\ -(\text{C})-\text{OH} \end{array}$ -羟亚氨酸 (-羟氨基替酸) (-hydroximic acid)
			$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ -(\text{C})-\text{NH}-\text{OH} \end{array}$ -羟氨酸 (-羟氨基替酸), N-羟基酰胺 (-hydroxamic acid, N-hydroxy amide)
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ -\text{C}-\text{OH} \end{array}$ -甲酸 (-carboxylic acid)	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ -\text{C}-\text{OOH} \end{array}$ -过氧甲酸 (-peroxycarboxylic acid)	$\begin{array}{c} \text{S} \\ \\ -\text{C}-\text{OH} \end{array}$ -硫代甲-O-酸 (-carbothioic O-acid)	$\begin{array}{c} \text{NH} \\ \\ -\text{C}-\text{OH} \end{array}$ -亚氨甲酸 (-氨基替甲酸) (-carboximide acid)
		$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ -\text{C}-\text{SH} \end{array}$ -硫代甲-S-酸 (-carbothioic S-acid)	$\begin{array}{c} \text{N}-\text{NH}_2 \\ \\ -\text{C}-\text{OH} \end{array}$ -胂甲酸 (-胂基替甲酸) (-carbohydrazonic acid)
		$\begin{array}{c} \text{S} \\ \\ -\text{C}-\text{SH} \end{array}$ 二硫代甲酸 (carbodithioic acid)	$\begin{array}{c} \text{N}-\text{OH} \\ \\ -\text{C}-\text{OH} \end{array}$ -羟亚氨甲酸 (-羟氨基替甲酸) (-carbohydroximic acid)
			$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ -\text{C}-\text{NH}-\text{OH} \end{array}$ -羟氨甲酸 (-羟氨基替甲酸) (-carbohydroxamic acid)

6.5.1.3.3 羟氨酸 (Hydroxamic acids)

羧基中的 ‘-OH’ 被 ‘-NH-OH’ 基团取代后所得羟氨酸的命名, 是将原羧酸系统命名中的后缀 ‘-酸 (-oic acid)’ 或 ‘-甲酸 (-carboxylic acid)’, 或者俗名中的词尾 ‘-酸

(-ic acid)’ 替换为对应的 ‘-羟氨(基替)酸 (-hydroxamic acid)’ 或 ‘-羟氨(基替)甲酸 (-carbohydroxamic acid)’ 即可 (参见表6-5-3), 名称中(基替)通常省略。但是, 羟氨酸通常还是倾向于采用 ‘*N*-羟基酰胺’ 来命名。

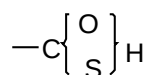
例:



N-羟基乙酰胺 (*N*-Hydroxyacetamide), 传统命名为: 乙羟氨酸(Acetohydroxamic acid)

6.5.1.3.4 硫代羧酸和硫代碳酸 (Thiocarboxylic, thiocarbonic acids)

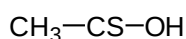
羧酸或碳酸中的氧原子被同属中硫、硒、碲等原子置换后所得酸的命名, 可在原名称前加前缀 ‘硫代’ (‘硒代’、‘碲代’ 等) 表示。由此得出的名称不区分混杂硫属原子置换的羧酸或碳酸的互变异构体, 此种非特异性可用如下结构式来表示:



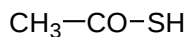
命名时, 可以在硫属混杂羧酸或碳酸 ‘酸’ 的前面加上斜体元素符号 (如 ‘-*S*-’、‘-*O*-’) 来区分不同的互变异构体 ‘-CO-SH’ 和 ‘-CS-OH’ (参见表6-5-3)。或者使用前缀 ‘羟基(硫代羰基)- (hydroxy(thiocarbonyl)-)’ 或 ‘巯基羰基- (sulfanylcarbonyl-)’ 来命名。

采用俗名命名的羧酸或碳酸中氧原子被同属其它原子置换后所得酸的命名可以在原名称前面加前缀 ‘硫代-’、‘硒代’、‘二硫代’ 等。

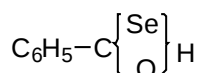
例:



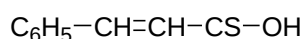
乙硫代-*O*-酸 (Thioacetic *O*-acid) (中文系统命名)



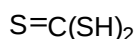
乙硫代-*S*-酸 (Thioacetic *S*-acid) (中文系统命名)



苯硒代甲酸 (Selenobenzoic acid) (中文系统命名)



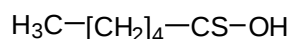
硫代肉桂-*O*-酸 (Thiocinnamic *O*-acid)



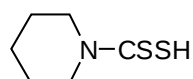
三硫代碳酸 (Trithiocarbonic acid)

若羧酸采用系统命名法命名，则羰基氧原子被同属其它原子取代后所得酸的命名，通过将原名称中后缀‘-酸 (-oic acid)’或‘-甲酸 (-carboxylic acid)’替换为相应的后缀‘-硫代酸 (-thioic acid)’、‘-硒代酸 (-selenoic acid)’、‘-二硫代甲酸 (-carbodithioic acid)’和‘-硒硫代甲酸-carboselenothioic acid’；而将原名称中的前缀‘羧基- (carboxy-)’替换为‘硫代羧基- (thiocarboxy-)’、‘二硒代羧基- (diselenocarboxy-)’和‘硒硫代羧基- (selenothiocarboxy-)’即可，当硫属元素位置明确时则可如上使用前缀‘羟基 (硫代羰基)- (hydroxy(thiocarbonyl)-)’或‘巯基羰基- (sulfanylcarbonyl-)’等方式来命名。

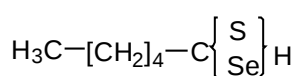
例：



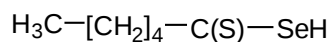
己硫代-*O*-酸 (Hexanethioic *O*-acid)



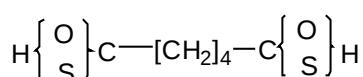
哌啶-1-二硫代甲酸 (Piperidine-1-carbodithioic acid)



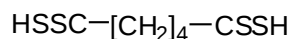
己硒硫代酸 (Hexaneselenothioic acid)



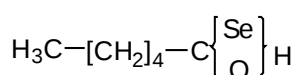
己硒硫代-*Se*-酸 (Hexaneselenothioic *Se*-acid)



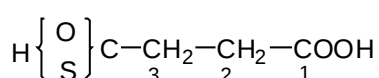
己二(硫代)酸 (Hexanebis(thioic) acid)



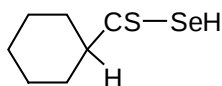
己二(二硫代)酸 (Hexanebis(dithioic) acid)



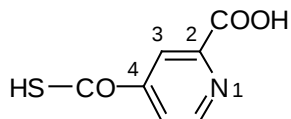
己硒代酸 (Hexaneselenoic acid)



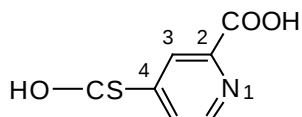
3-(硫代羧基)丙酸 (3-(Thiocarboxy)propanoic acid)



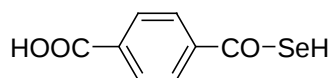
环己烷硒硫代甲-*Se*-酸 (Cyclohexanecarboselenothioic *Se*-acid)



4-(巯基羰基)吡啶-2-甲酸 (4-(Sulfanylcabonyl)pyridine-2-carboxylic acid)



4-[羟基(硫代羰基)]吡啶-2-甲酸 (4-[Hydroxy(thiocarbonyl)]pyridine-2-carboxylic acid,
4-[Hydroxy(carbonothioyl)]pyridine-2-carboxylic acid)

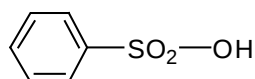


4-(氢硒基羰基)苯甲酸 (4-(selanylcabonyl)benzoic acid)

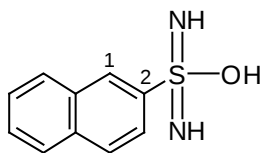
6.5.2. 含有硫属原子直接与有机基团相连的硫属酸

6.5.2.1. 含有硫属原子直接与有机基团相连的硫属酸的命名，可按取代命名法在相应母体氢化物名称的基础上添加适当的后缀，如表 6-5-4 所示。磺酸 (sulfonic acid) 和亚磺酸 (sulfinic acid) 作为取代基时可分别用前缀 ‘磺酸基-(sulfo-)’ 和 ‘亚磺酸基-(sulfin-)’ 表示。

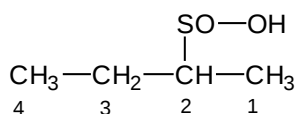
例：



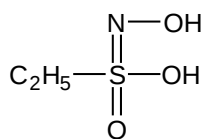
苯磺酸 (Benzenesulfonic acid)



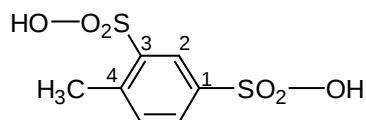
萘-2-二氨基亚基替磺酸
(Naphthalene-2-sulfonodiimide acid)



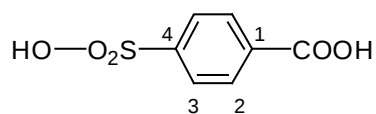
丁-2-亚磺酸 (Butane-2-sulfinic acid)



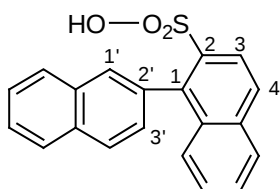
乙羟氨亚基替磺酸 (Ethanesulfonohydroxamic acid)



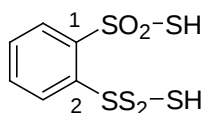
4-甲基苯-1,3-二磺酸 (4-Methylbenzene-1,3-disulfonic acid)



4-磺酸基苯甲酸 (4-Sulfobenzoic acid)



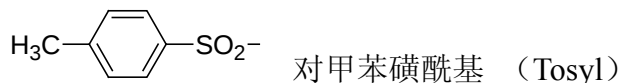
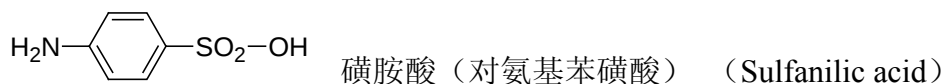
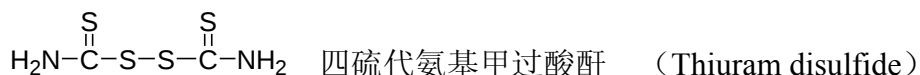
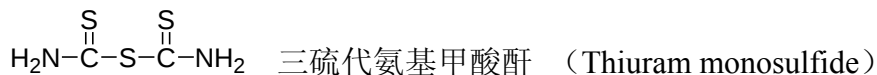
[1,2'-联萘]-2-磺酸 ([1,2'-Binaphthalene]-2-sulfonic acid)



2-(三硫代磺酸基)苯-1-硫代磺-S-酸 (2-(trithiosulfo)benzene-1-sulfonothioic S-acid)

英文中有一些保留使用俗名的这类化合物和取代基，但中文中除磺胺酸外仍用系统名。

例：



$\text{H}_3\text{C}-\text{SO}_2^-$ 甲磺酰基 (Mesyl)

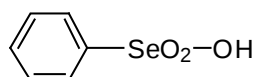
表6-5-4 磺酸及其置换类似物的后缀

	‘-SH’置换‘-OH’ 和/或‘=S’置换‘=O’	‘=NH’置换‘=O’
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ -\text{S}-\text{OH} \end{array}$ 亚磺酸 (-sulfinic acid)	$\begin{array}{c} \text{S} \\ \\ -\text{S}-\text{OH} \end{array}$ 硫代亚磺-O-酸 (-thiosulfinic O-acid)	$\begin{array}{c} \text{NH} \\ \\ -\text{S}-\text{OH} \end{array}$ 氮亚基替亚磺酸 (-sulfinimidic acid)
	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ -\text{S}-\text{SH} \end{array}$ 硫代亚磺-S-酸 (-thiosulfinic S-acid)	$\begin{array}{c} \text{N}-\text{NH}_2 \\ \\ -\text{S}-\text{OH} \end{array}$ 肼基替亚磺酸 (-sulfinohydrazonic acid)
	$\begin{array}{c} \text{S} \\ \\ -\text{S}-\text{SH} \end{array}$ 二硫代亚磺酸 (-dithiosulfinic acid)	$\begin{array}{c} \text{N}-\text{OH} \\ \\ -\text{S}-\text{OH} \end{array}$ 羟氮亚基替亚磺酸 (-sulfinohydroxamic acid)
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ -\text{S}-\text{OH} \\ \\ \text{O} \end{array}$ 磺酸 (-sulfonic acid)	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ -\text{S}-\text{OH} \\ \\ \text{S} \end{array}$ 硫代磺-O-酸 (thiosulfonic O-acid)	$\begin{array}{c} \text{NH} \\ \\ -\text{S}-\text{OH} \\ \\ \text{O} \end{array}$ 氮亚基替磺酸 (-sulfonimidic acid)
	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ -\text{S}-\text{SH} \\ \\ \text{O} \end{array}$ 硫代磺-S-酸 (thiosulfonic S-acid)	$\begin{array}{c} \text{N}-\text{NH}_2 \\ \\ -\text{S}-\text{OH} \\ \\ \text{O} \end{array}$ 肼基替磺酸 (-sulfonohydrazonic acid)
	$\begin{array}{c} \text{S} \\ \\ -\text{S}-\text{OH} \\ \\ \text{S} \end{array}$ 二硫代磺-O-酸 (-dithiosulfonic O-acid)	$\begin{array}{c} \text{N}-\text{OH} \\ \\ -\text{S}-\text{OH} \\ \\ \text{O} \end{array}$ 羟氮亚基替磺酸 (-sulfonohydroxamic acid)

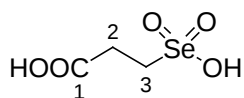
	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ -\text{S}-\text{SH} \\ \parallel \\ \text{S} \end{array}$ 二硫代磺-S-酸 (-dithiosulfonic S-acid)	$\begin{array}{c} \text{NH} \\ \parallel \\ -\text{S}-\text{OH} \\ \parallel \\ \text{S} \end{array}$ 硫代氨基亚基替磺-O-酸 (-thiosulfonimidic O-acid)
	$\begin{array}{c} \text{S} \\ \parallel \\ -\text{S}-\text{SH} \\ \parallel \\ \text{S} \end{array}$ 三硫代磺酸 (-trithiosulfonic acid)	$\begin{array}{c} \text{NH} \\ \parallel \\ -\text{S}-\text{SH} \\ \parallel \\ \text{O} \end{array}$ 硫代氨基亚基替磺-S-酸 (-thiosulfonimidic S-acid)
		$\begin{array}{c} \text{NH} \\ \parallel \\ -\text{S}-\text{OH} \\ \parallel \\ \text{NH} \end{array}$ 二氨基亚基替磺酸 (-sulfonodiimidic acid)
$\text{S}(\text{O})_2-\text{O}$ 磺内酯 (-sultone)		$\text{S}(\text{O})_2-\text{NH}$ 磺内酰胺 (-sultam)

6.5.2.2 含有硒原子直接与有机基团相连的硒酸，命名方式与相应的磺酸类似，将磺酸名称中的词根‘磺(sulf-)’替换为‘硒(selen-)’即可。需说明的是此处的有机硒酸结构式为 $\text{R-Se(=O)}_2\text{-OH}$ ，英文名selenonic acid，有别于结构式为 $\text{HO-Se(=O)}_2\text{-OH}$ 的无机硒酸，英文名selenic acid，因有机硒酸化合物罕见，故不另取它名。

例：



苯硒酸 (Benzeneselenonic acid)



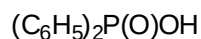
3-硒酸基丙酸 (3-Selenopropionic acid)

6.5.3. 含有磷原子或砷原子直接与有机基团相连的磷氧酸或砷氧酸

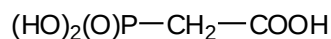
6.5.3.1. 含有五价磷原子直接与某个有机基团相连的磷氧酸（磷酸，次磷酸）及其置换物，作为官能性母体化合物的衍生物按取代法进行命名，如表6-5-5所示。其它的置换

产物用表4-3（参见4.4节）中词缀进行命名。有关含磷基团的前缀参见表4-2（参见4.3节）。磷酸（phosphonic acid）结构式为 $\text{RP}(\text{O})(\text{OH})_2$ ，而不与有机基团相连的无机的磷酸（phosphoric acid）结构式为 $\text{P}(\text{O})(\text{OH})_3$ 。

例：



二苯基次磷酸（Diphenylphosphinic acid）



膦酸基乙酸（Phosphonoacetic acid）



乙基膦酸（Ethylphosphonic acid）

表6-5-5. 磷酸的官能性母体化合物及其官能团置换衍生物

母体化合物	‘-SH’置换‘-OH’ 和/或‘=S’置换‘=O’	‘=NH’置换‘=O’
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{H}_2\text{P}-\text{OH} \end{array}$ 次磷酸（Phosphinic acid）	$\begin{array}{c} \text{S} \\ \\ \text{H}_2\text{P}-\text{OH} \end{array}$ 硫代次膦-O-酸 （Phosphinothioic O-acid）	$\begin{array}{c} \text{NH} \\ \\ \text{H}_2\text{P}-\text{OH} \end{array}$ 氨亚基替次膦酸 （Phosphinimidic acid）
	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{H}_2\text{P}-\text{SH} \end{array}$ 硫代次膦-S-酸 Phosphinothioic S-acid	
	$\begin{array}{c} \text{S} \\ \\ \text{H}_2\text{P}-\text{SH} \end{array}$ 二硫代次膦酸 （Phosphinodithioic acid）	
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{HP}-\text{OH} \\ \\ \text{OH} \end{array}$ 磷酸（Phosphonic acid）	$\begin{array}{c} \text{S} \\ \\ \text{HP}-\text{OH} \\ \\ \text{OH} \end{array}$ 硫代膦-O,O’-酸 （Phosphonothioic O,O’-acid）	$\begin{array}{c} \text{NH} \\ \\ \text{HP}-\text{SH} \\ \\ \text{OH} \end{array}$ 氨亚基替硫代膦-O,S-酸 （Phosphonimidothioic acid）
	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{HP}-\text{OH} \\ \\ \text{SH} \end{array}$ 硫代膦-O,S-酸 （Phosphonothioic O,S-acid）	

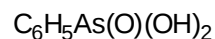
	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{HP}-\text{SH} \\ \\ \text{SH} \end{array}$ 二硫代磷- <i>S,S'</i> -酸 (Phosphonodithioic <i>S,S'</i> -acid)	
	$\begin{array}{c} \text{S} \\ \\ \text{HP}-\text{SH} \\ \\ \text{SH} \end{array}$ 三硫代磷酸 (Phosphonotrithioic acid)	

6.5.3.2. 含有五价砷原子直接与某个有机基团相连的砷氧酸（肿酸，次肿酸）及其置换衍生物的命名方法与磷酸相似（参见6.5.3.1）。肿酸（arsonic acid）结构式 $\text{RAs}(\text{O})(\text{OH})_2$ ，而无机的砷酸（arsenic acid）结构式 $\text{As}(\text{O})(\text{OH})_3$ 。

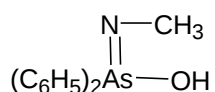
例：



二甲基次肿酸（Dimethylarsinic acid）



苯基肿酸（Phenylarsonic acid）



N-甲基-*As,As*-二苯基氮亚基替次肿酸

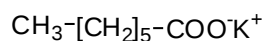
(*N*-Methyl-*As,As*-diphenylarsinimidic acid)

6.5.4. 盐和酯

6.5.4.1. 盐

有机酸的中性盐的命名，英文中先给出正离子名称，后面再给出负离子（酸根离子）名称，两名称之间用空格分开；中文中则反过来排列，采用酸名后加正离子字样。有多个正离子时，除氢排首位外，其余按照英文字母顺序排列。

例：



庚酸钾（Potassium heptanoate）

$\text{CH}_3\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CSS}^-\text{K}^+$
二硫代戊酸钾 (Potassium pentanedithioate)

$(\text{CH}_3\text{—COO}^-)_2\text{Ca}^{2+}$
二乙酸钙 (Calcium diacetate)

$\text{C}_6\text{H}_5\text{—SO}_2^-\text{Na}^+$
苯亚磺酸钠 (Sodium benzenesulfinate)

$\text{K}^+\text{OOC—[CH}_2\text{]}_2\text{—COO}^-\text{Na}^+$
丁二酸钾钠 (Potassium sodium succinate)

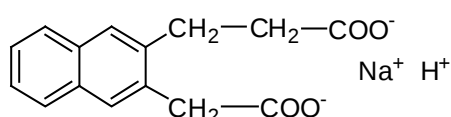
$\text{K}^+\text{OOC—[CH}_2\text{]}_5\text{—COO}^-\text{NH}_4^+$
庚二酸铵钾 (Ammonium potassium heptanedioate)

$\text{H}_3\text{C—P(O)(O}^-\text{)}_2\text{K}^+\text{H}^+$
甲基麟酸氢钾 (Potassium hydrogen methylphosphonate)

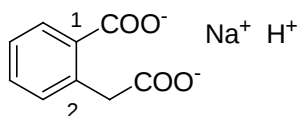
多元有机酸的酸性盐的命名和中性盐命名方法一致，在负离子（酸根离子）和正离子之间插入“氢”（或二氢等，视情况而定）表示余下的氢原子。离子取代基如 —COO^- ， $\text{—SO}_2\text{O}^-$ 和 $\text{—PO(O}^-\text{)}$ 分别用前缀‘羧酸根离子基（carboxylato-）’，‘磺酸根离子基（sulfonato-）’和‘麟酸根离子基（phosphonato-）’表示。

例：

$\text{HOOC—[CH}_2\text{]}_5\text{—COO}^-\text{K}^+$
庚二酸氢钾 (Potassium hydrogen heptanedioate)



3-[3-(羧酸根离子基甲基)萘-2-基]丙酸氢钠 (Sodium hydrogen 3-[3-(carboxylatomethyl)naphth-2-yl]propanoate)



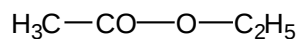
2-(羧酸根离子基甲基)苯甲酸氢钠 (Sodium hydrogen 2-(carboxylatometyl)benzoate)

6.5.4.2. 酯

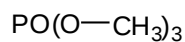
完全酯化的酸的命名方法和中性盐的命名一样，只是以烷基、芳基等取代基代替正离子，并以‘酯’为词尾。当有不只一个取代基时，则按英文名的字母顺序排列。烷基、

芳基等取代基名后的‘基’字通常省略。

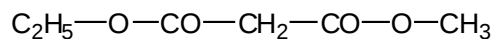
例：



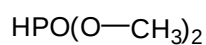
乙酸乙酯 (Ethyl acetate)



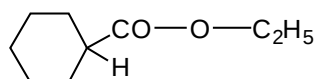
磷酸三甲(基)酯 (Trimethyl phosphate)



丙二酸乙(基)甲(基)酯 (Ethyl methyl malonate)



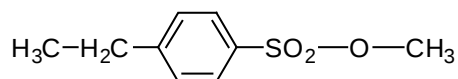
磷酸二甲(基)酯 (Dimethyl phosphonate)



环己甲酸乙(基)酯 (Ethyl cyclohexanecarboxylate)



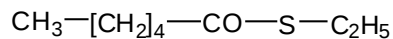
甲基磷酸二乙(基)酯 (Diethyl methylphosphonate)



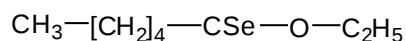
4-乙基苯磺酸甲(基)酯 (Methyl 4-ethylbenzenesulfonate)

硫醇或硒醇的羧酸酯要在烷基, 芳基等取代基前面加上相应的斜体元素符号作为连缀, 如*S*-, *O*-。

例：



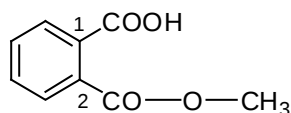
己硫代酸-*S*-乙(基)酯 (*S*-Ethyl hexanethioate)



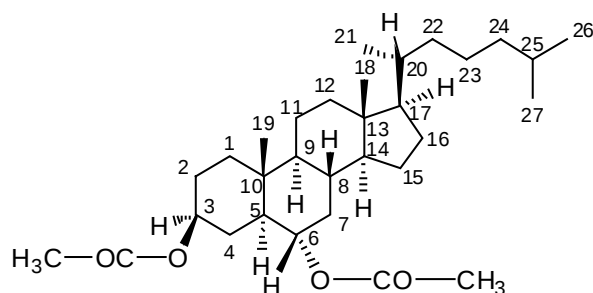
己硒代酸-*O*-乙(基)酯 (*O*-Ethyl hexaneselenoate)

天然产物和索引中酯的命名常采用官能团类别命名法。

例：



邻苯二甲酸单甲酯 (Phthalic acid monomethyl ester)



5α-胆甾烷-3β,6α-二醇二乙酸酯 (5α-Cholestane-3β,6α-diol diacetate)

部分酯化的多元酸和他们的盐的命名的步骤和中性酯和盐一致；各个部分按氢、正离子、烷基或芳基基团、最后加酯的顺序排列在酸名后（英文中则置于酸根名前，且氢紧接酸根名前），必要时用数字位次或斜体元素符号进行标注。

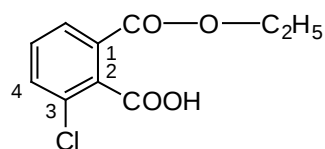
例：

$\text{C}_2\text{H}_5-\text{O}-\text{CO}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{COO}^-\text{Na}^+$
琥珀酸钠乙(基)酯 (Sodium ethyl succinate)

$\text{C}_2\text{H}_5-\text{S}-\text{CO}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{C}\left\{\begin{smallmatrix} \text{O} \\ \text{S} \end{smallmatrix}\right\}^-\text{Li}^+$
丁二(硫代酸)锂-S-乙(基)酯 (Lithium S-ethyl butanebis(thioate))

$\text{C}_2\text{H}_5-\text{O}-\text{CO}-\text{CH}_2-\overset{\text{COO}^-}{\underset{\text{1}}{\text{C}}(\text{OH})}-\overset{\text{2}}{\text{CH}_2}-\overset{\text{3}}{\text{COO}^-\text{K}^+\text{H}^+}$
柠檬酸氢钾-5-乙(基)酯 (Potassium 5-ethyl hydrogen citrate)

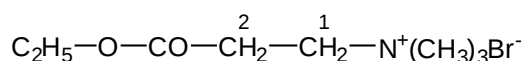
$\text{HO}-\text{SO}_2-\text{O}-\text{C}_2\text{H}_5$
硫酸氢乙(基)酯 (Ethyl hydrogen sulfate)



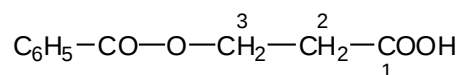
3-氯-邻苯二甲酸氢-1-乙(基)酯 (1-Ethyl hydrogen 3-chlorophthalate)
(注意：二元酸的编号要保留)

在通式为 $\text{R}-\text{CO}-\text{O}-\text{R}'$ 的酯中，如存在有优先作为后缀的基团（见第5章表5-2，第4章表4-1），或者不能用上面的方法来表示所有的酯基时，则酯基可分别用前缀‘烷氧羰基-或芳氧羰基-’ (alkoxycarbonyl- or aryloxy carbonyl-) 表示 $-\text{CO}-\text{OR}'$ ；用‘酰氧基-’ (acyloxy-) 表示 $\text{R}-\text{CO}-\text{O}-$ 。

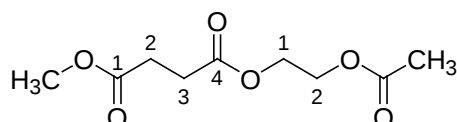
例:



[2-(乙氧羰基)乙基]三甲胺溴盐 (溴化[2-(乙氧羰基)乙基]三甲铵)
([2-(Ethoxycarbonyl)ethyl]trimethylammonium bromide)



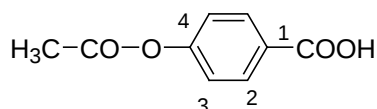
3-苯甲酰氧基丙酸 (3-(Benzoyloxy)propanoic acid)



丁二酸(2-乙酰氧基乙基)甲基酯 (2-Aetoxyethyl methyl butanedioate)

当存在有优先作为主特性基团的基团时,酯的表述,尤其是在编写索引时,可采用官能团类别命名法。

例:



4-羟基苯甲酸乙酸酯 (4-Hydroxybenzoic acid acetate) ——官能团类别命名法

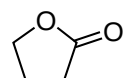
4-乙酰氧基苯甲酸 (4-acetylbenzoic acid) ——取代命名法

6.5.5. 内酯、内酰胺、内亚氨酸及其类似物 (Lactones, lactams, lactims, and analogues)

内酯和内酰胺可分别看作羟基羧酸或氨基羧酸分子内脱水得到。内酰胺的互变异构体称内亚氨酸(内氨基基替酸)(lactim)。此类化合物以杂环化合物来命名当更好,但此处也给出把它们当作羟基羧酸或氨基羧酸衍生物时的命名。

6.5.5.1. 内酯 羟基羧酸分子内形成的酯称内酯,按杂环来命名,或用“内酯”来代替俗名羟基酸中的“酸”而命名;而对系统命名的羟基酸,则将其本来名称后的“酸”改为“内酯”,并在此前插入形成内酯的酸和羟基的位次来命名,酸为1-位时可省略。

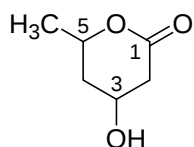
例:



四氢呋喃-2-酮 (Tetrahydrofuran-2-one)

丁-4-内酯 (Butano-4-lactone, Butan-1,4-olide)

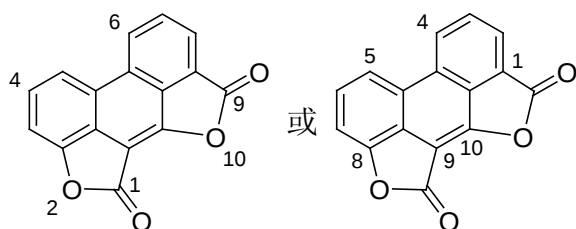
(传统命名为γ-丁内酯 (γ-Butyrolactone))



3-羟基己-1,5-内酯 (3-Hydroxyhexan-1,5-olide, 3-Hydroxyhexano-1,5-lactone)

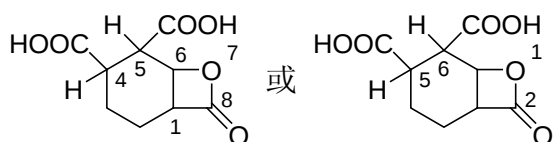
如多环系统中一个或多个(但不是所有的)是内酯时,则可在环系的名称后加上后缀‘-碳内酯’(-carb lactone)(表示环中的一O—CO—基团),以此表述此环系上的两个氢原子为基团—O—CO—所置换,并用一对位次分别标明内酯羰基和氧原子连接环系的位置,羰基的位次标识在前,如果还有其他选择,羰基则取较低的位次。如有两个或多个内酯环时,每组标识位次的前缀之间用冒号“:”隔开。

例:



菲并[1,10-*bc*:9,8-*b'c'*]二呋喃-1,9-二酮 (Phenanthro[1,10-*bc*:9,8-*b'c'*]difuran-1,9-dione)(内酯作为杂环来命名)

菲-1,10:9,8-二碳内酯 (Phenanthrene-1,10:9,8-dicarb lactone)(内酯作为官能团类别时的命名)

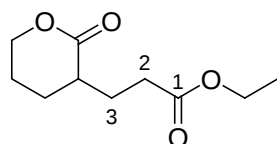


8-氧亚基-7-氧杂双环[4.2.0]辛烷-4,5-二甲酸

(8-Oxo-7-oxabicyclo[4.2.0]octane-4,5-dicarboxylic acid)(参见3.6.2.节)

或 2-氧亚基六氢-2*H*-苯并氧杂丁环-5,6-二甲酸

(2-Oxohexahydro-2*H*-benzooxete-5,6-dicarboxylic acid)(参见3.5.节)



3-(2-氧亚基氧杂己环烷-3-基)丙酸乙酯 (Ethyl 3-(2-oxooxan-3-yl)propanoate)

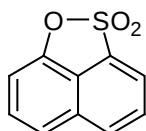
3-(2-氧亚基四氢吡喃-3-基)丙酸乙酯 (Ethyl 3-(2-oxotetrahydropyran-3-yl)propanoate)

6.5.5.2. 磺内酯 (Sultones)

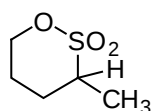
羟基磺酸分子内形成的酯称磺内酯,可按杂环来命名,或在相应的母体氢化物名称

后面加上术语“磺内酯”表示环状结构中的 $\text{—O—SO}_2\text{—}$ 基团，并在前面加上描述磺酰基团和氧原子连接位点的位次标识，磺酰基团的位次标识在前，如果还有其他选择，则磺酰基取较低的位次。有两个或多个磺内酯环时，每组标识位次的后缀之间用逗号“:”隔开。羟基亚磺酸分子内形成的酯称亚磺内酯（Sultines），表示环状结构中的 —O—SO— 基团，采用与磺内酯类似的方式命名。

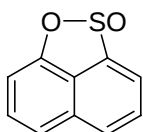
例：



萘并[1,8-*cd*][1,2]氧硫杂戊环-2,2-二氧化物（Naphtho[1,8-*cd*][1,2]oxathiole 2,2-dioxide）
萘-1,8-磺内酯（Naphthalene-1,8-sultone）



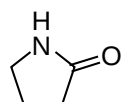
3-甲基-1,2-氧硫杂环己烷-2,2-二氧化物（3-Methyl-1,2-oxathiane 2,2-dioxide）
戊烷-2,5-磺内酯（Pentane-2,5-sultone），不是 戊烷-4,1-磺内酯（Pentane-4,1-sultone）（磺酰基取较低的位次）



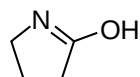
萘并[1,8-*cd*][1,2]氧硫杂戊环-2-氧化物（Naphtho[1,8-*cd*][1,2]oxathiole 2-oxide）
萘-1,8-亚磺内酯（Naphthalene-1,8-sultine）

6.5.5.3. 内酰胺和内亚氨酸 带有一 —CO—NH— 基团作为环的一部分的内酯含氮类似物一般称做内酰胺（Lactams），它的互变异构体“ —C(OH)=N— ”则称做内亚氨酸（Lactims）。这类化合物一般按杂环化合物来命名，或者按照6.5.5.1.节命名内酯的方式，但用‘-内酰胺’或‘-内亚氨酸’代替‘-内酯’作为后缀。

例：



四氢吡咯-2-酮（Tetrahydropyrrol-2-one）
吡咯烷-2-酮（Pyrrolidin-2-one (2-Pyrrolidone)）
丁-4-内酰胺（Butano-4-lactam）



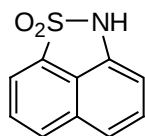
3,4-二氢-2*H*-吡咯-5-醇（3,4-Dihydro-2*H*-pyrrol-5-ol）

丁-4-内亚氨酸 (Butano-4-lactim)

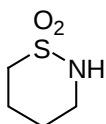
6.5.5.4. 磺内酰胺 (Sultams)

带有一 $\text{SO}_2\text{—NH—}$ 作为环的一部分的磺内酯的含氮类似物按杂环命名，或者按照6.5.5.2节命名磺内酯的方式，但用“-磺内酰胺”代替“-磺内酯”作为后缀，并且磺酰基的位次标识放前面，如果还有其它选择的话，应优先采用磺酰基较亚氨基低的位次。

例：



2H-萘并[1,8-cd]异噻唑-1,1-二氧化物 (2H-Naphtho[1,8-cd]isothiazole 1,1-dioxide)
萘-1,8-磺内酰胺 (Naphthalene-1,8-sultam)

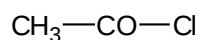


1,2-硫氮杂己环烷-1,1-二氧化物 (1,2-Thiazinane 1,1-dioxide)
丁-1,4-磺内酰胺 (Butane-1,4-sultam)

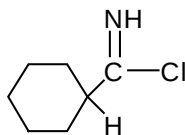
6.5.6 酰卤化合物 (Acid halides)

所有作为主特性基团的酸（羧酸、磺酸、亚磺酸、硒酸等）的羟基被卤原子取代了的酰卤化物，其命名是在酰基名称后面加上相应的卤原子的名称，并按字母顺序排列，如需要还要在卤原子名称前面加上表述该卤原子个数的前缀。

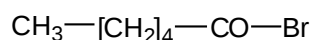
例：



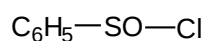
乙酰氯 (Acetyl chloride)



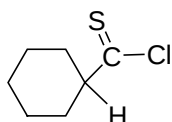
环己烷甲亚氨酰氯 (环己烷甲氨亚基替酰氯) (Cyclohexanecarboximidoyl chloride)



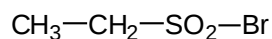
己酰溴 (Hexanoyl bromide)



苯亚磺酰氯 (Benzenesulfinyl chloride)



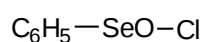
环己烷硫代甲酰氯 (Cyclohexanecarbothioyl chloride)



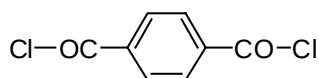
乙磺酰溴 (Ethanesulfonyl bromide)



丙二酰溴氯 (Malonyl bromide chloride)



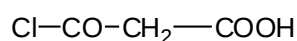
苯亚硒酰氯 (Benzeneseleninyl chloride)



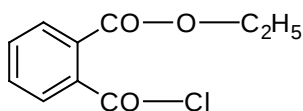
对苯二甲酰二氯 (Terephthaloyl dichloride)

当有优先作为主体的其它基团存在时或酰卤基团连接在取代基上时,酰卤基可采用前缀诸如“氟羰基- (Fluorocarbonyl-)”, “氯羰基- (Chlorocarbonyl-)”, “溴羰基- (Bromocarbonyl-)”或“碘羰基- (iodocarbonyl-)”等来表示。

例:



氯羰基乙酸 ((Chlorocarbonyl)acetic acid)



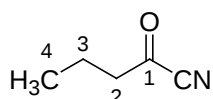
2-氯羰基苯甲酸乙酯 (Ethyl 2-(chlorocarbonyl)benzoate)

酸(羧酸、磺酸、亚磺酸、硒酸等)的羟基被拟卤素基团(N_3 , CN , NC , NCO , NCS , NCTe)取代了的酰拟卤化物,其命名与酰卤化合物类似,在酰基名称后面加上相应的拟卤素基团的名称。作前缀时以它们的前缀名加羰基构成。它们的高位顺序为: $\text{N}_3 > \text{CN} > \text{NC} > \text{NCO} > \text{NCS} > \text{NCSe} > \text{NCTe}$,但它们均低于卤素。

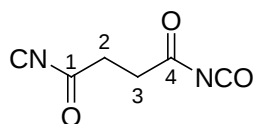
拟卤素基团	后缀	英文后缀	前缀	英文前缀
$-\text{N}_3$	叠氮	Azide	叠氮基	Azido
$-\text{CN}$	氰化物	Cyanide	氰基	Cyano

-NC	异氰化物	Isocyanide	异氰基	Isocyano
-NCO	异氰酸酯	Isocyanate	异氰氧基	Isocyanato
-NCS	异硫氰酸酯	Isothiocyante	异氰硫基	Isothiocyanto
-NCSe	异硒氰酸酯	Isoselenocyanate	异氰硒基	isoselenocyanato
-NCTe	异碲氰酸酯	isotellurocyanate	异氰碲基	isotellurocyanato

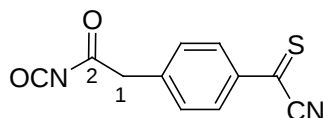
例：



丁酰氰化物 (butanoyl cyanide, butyryl cyanide)



丁二酰(异氰酸酯)异氰化物 (butanedioyl isocyanate isocyanide)

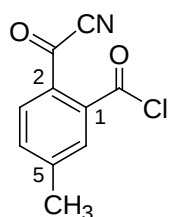


4-(异氰氧基羰基甲基)苯硫代甲酰氰化物

(4-(isocyanatocarbonylmethyl)benzenecarbothioyl cyanide)

4-(2-异氰氧基-2-氧亚基乙基)苯硫代甲酰氰化物

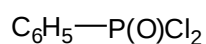
(4-(2-isocyanato-2-oxoethyl)benzenecarbothioyl cyanide)



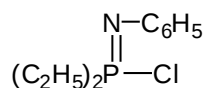
2-(氰基羰基)-5-甲基苯甲酰氯 (2-(cyanocarbonyl)-5-methylbenzoyl chloride,
2-(carbonocyanido)-5-methylbenzoyl chloride)

单核含氧酸的酰卤化物及其类似物的命名通常采用官能团置换法来命名 (见4.4.节), 即和上面一样命名为酰卤, 将对应酸的命名中的酸换成相应的卤素。

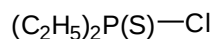
例：



苯膦酰二氯 (Phenylphosphonic dichloride, Phenylphosphonyl dichloride)



P,P-二乙基-*N*-苯基次膦氨基亚基替酰氯 (*P,P*-Diethyl-*N*-phenylphosphinimidic chloride, *P,P*-Diethyl-*N*-phenylphosphinimidoyl chloride)



二乙基硫代次膦酰氯 (Diethylphosphinothioic chloride)
(Diethylphosphinothioyl chloride)

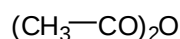
6.5.7. 酸酐及其类似物 (Anhydrides and their analogues)

形式上，酸酐为两个酸官能团脱一分子水所形成的化合物。

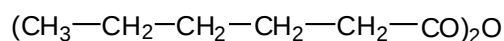
6.5.7.1 对称的酸酐

取代的或无取代的一元酸的对称酸酐的命名一般是将对应的酸的名称中的酸换成酸酐。

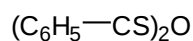
例：



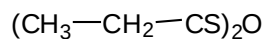
乙酸酐 (Acetic anhydride)



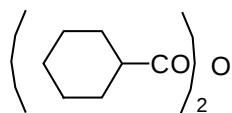
己酸酐 (Hexanoic anhydride)



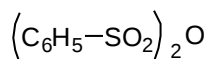
苯硫代甲酸酐 ((Thiobenzonic) anhydride)



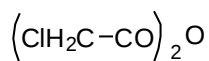
丙硫代酸酐 ((Thiopropionic) anhydride)



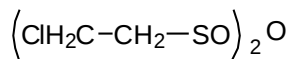
环己甲酸酐 (Cyclohexanecarboxylic anhydride)



苯磺酸酐 (Benzenesulfonic anhydride)



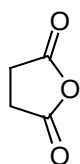
氯乙酸酐 (Chloroacetic anhydride)



2-氯代乙亚磺酸酐 (2-Chloroethanesulfinic anhydride)

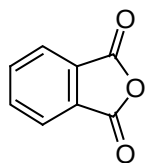
由同一个母体氢化物上两个酸基脱水形成的环状酸酐按对称酸酐命名, 或按杂环化合物命名。

例:



琥珀酸酐 (Succinic anhydride)

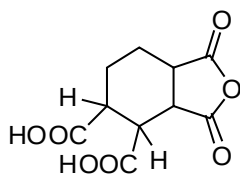
四氢呋喃-2,5-二酮 (Tetrahydrofuran-2,5-dione)



邻苯二甲酸酐 (Phthalic anhydride)

1,3-二氢苯并[c]呋喃-1,3-二酮 (1,3-Dihydrobenzo[c]furan-1,3-dione)

1,3-二氢异苯并呋喃-1,3-二酮 (1,3-Dihydroisobenzofuran-1,3-dione)



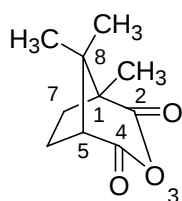
环己烷-1,2,3,4-四甲酸-3,4-酐 (Cyclohexane-1,2,3,4-tetracarboxylic acid 3,4-anhydride)

1,3-二氧亚基八氢苯并[c]呋喃-4,5-二甲酸

(1,3-Dioxooctahydrobenzo[c]furan-4,5-dicarboxylic acid)

1,3-二氧亚基八氢异苯并呋喃-4,5-二甲酸

(1,3-Dioxooctahydroisobenzofuran-4,5-dicarboxylic acid)

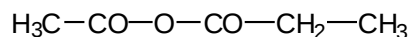


1,8,8-三甲基-3-氧杂双环[3.2.1]辛-2,4-二酮
 (1,8,8-trimethyl-3-oxabicyclo[3.2.1]octane-2,4-dione)
 樟脑酸酐 (camphoric anhydride) - 俗名

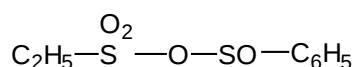
6.5.7.2 不对称(混合)酸酐

不同的一元酸形成的酸酐的命名系将形成酐的两个酸的名称按字母顺序排列,再以酸酐结尾。

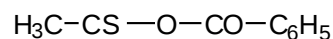
例:



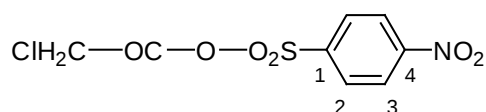
乙丙酸酐 (Acetic propionic anhydride)



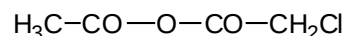
苯亚磺(酸)乙磺酸酐 (Benzenesulfinic ethanesulfonic anhydride)



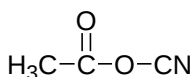
苯甲(酸)硫代乙酸酐 (Benzoic thioacetic anhydride)



氯乙(酸)-4-硝基苯磺酸酐 (Chloroacetic 4-nitrobenzenesulfonic anhydride)



乙(酸)氯乙酸酐 (Acetic chloroacetic anhydride)



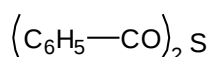
乙(酸)氰酸酐 (Acetic cyanic anhydride)

6.5.7.3 酸酐的硫属类似物

含有结构通式 $-\text{CO}-\text{S}-\text{CO}-$, $-\text{CO}-\text{S}-\text{CS}-$ 或 $-\text{CS}-\text{S}-\text{CS}-$ 的酸酐的硫属类似物,其命名和他们的氧类似物一样,采用类别名硫代酸酐(thioanhydride)。酰基基团之间的硫用前缀“硫代(thio-)”表示,其他的硫原子则在相应的酰基基团前面加上前缀“硫代(thio-)”。

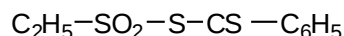
硫代酸酐还可基于母体氢化物硫烷来命名,其相应的类别名为二酰基硫烷(diacylsulfanes)。

例:



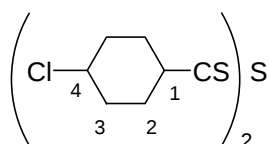
苯甲酸硫代酸酐 (Benzoic thioanhydride)

二苯甲酰基硫烷 (Dibenzoylsulfane)



乙磺酸苯硫代甲酸硫代酸酐 (Ethanesulfonic thiobenzoic thioanhydride)

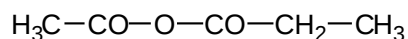
乙磺酰基(苯硫代甲酰基)硫烷 (Ethanesulfonyl(thiobenzoyl)sulfane)



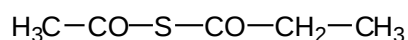
4-氯环己烷-1-甲酸硫代酸酐 (4-Chlorocyclohexane-1-carbothioic thioanhydride)

二(4-氯环己基-1-甲硫酰基)硫烷 (Bis(4-chlorocyclohexane-1-carbothioyl)sulfane)

各种不同硫属元素置换的酸酐的命名可参考从乙酸丙酸酐派生出来的各种不对称硫代酸酐的命名方式(见下)进行命名。

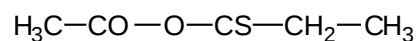


乙酸丙酸酐 (Acetic propionic anhydride)

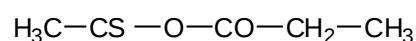


乙酸丙酸硫代酸酐 (Acetic propionic thioanhydride)

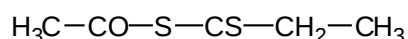
乙酰基丙酰基硫烷 (Acetyl(propionyl)sulfane)



乙酸丙硫代酸酐 (Acetic thioacetic anhydride)

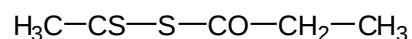


丙酸乙硫代酸酐 (Propionic thioacetic anhydride)



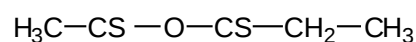
乙酸丙硫代酸硫代酸酐 (Acetic thiopropionic thianhydride)

乙酰基(丙硫代酰基)硫烷 (Acetyl(thiopropionyl)sulfane)

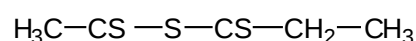


丙酸乙硫代酸硫代酸酐 (Propionic thioacetic thioanhydride)

丙酰基(乙硫代酰基)硫烷 (Propietyl(thioacetyl)sulfane)



乙硫代酸丙硫代酸酐 (Thioacetic thiopropionic anhydride)



乙硫代酸丙硫代酸硫代酸酐 (Thioacetic thiopropionic thioanhydride)

乙硫代酰基(丙硫代酰基)硫烷 (Thioacetyl(thiopropionyl)sulfane)

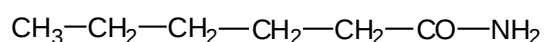
6.5.8 酰胺、酰亚胺及酰肼 (Amides, imides and hydrazides)

6.5.8.1 氨的单酰基衍生物的命名, 将原羧酸名称中的后缀‘-酸’或‘-甲酸’ ‘替换为相应的‘酰胺’或‘甲酰胺’即可。‘-CO-NH₂’作为取代基时用前缀‘甲酰胺基-(carbamoyl-)’表示。

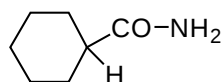
例:



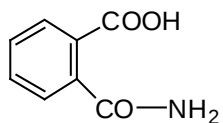
乙酰胺 (acetamide)



己酰胺 (Hexanamide)

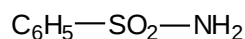


环己烷甲酰胺 (Cyclohexanecarboxamide)



2-甲酰胺基苯甲酸 (2-Carbamoyl benzoic acid)

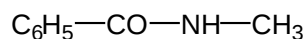
苯甲酰胺甲酸 (Phthalamic acid) (参见6.5.1.2.2.节)



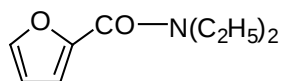
苯磺酰胺 (Benzenesulfonamide)

酰胺(磺酰胺)中氮上的氢被其它取代基取代后所得结构(如R-CO-NHR'或R-CO-CRR')命名时, 通常将取代基R, R'名称前加‘N-’后作为前缀进行表述(英文命名中N-苯基衍生物除外)。

例:



N-甲基苯甲酰胺 (N-methylbenzamide)

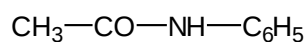


N,N-二乙基-呋喃-2-甲酰胺 (N,N-diethyl-2-furamide, N,N-diethylfuran-2-carboxamide)

单酰胺的N-苯基衍生物英文中有专用词 *anilides*, 中文称‘酰苯胺’, 命名时可用

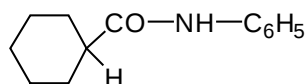
后缀‘-酰苯胺(-anilide)’替换‘-酰胺(amide)’，‘*N*-苯基’环上有取代基时，其位次编号加撇。但也可按一般*N*-取代酰胺方式命名。

例：

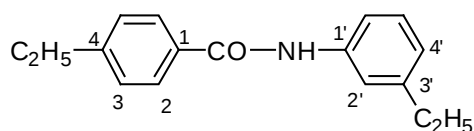


乙酰苯胺 (Acetanilide)

N-苯基乙酰胺 (*N*-Phenylacetamide)



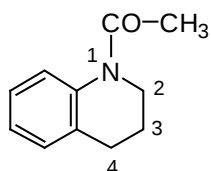
环己烷甲酰苯胺 (Cyclohexanecarboxanilide)



3',4'-二乙基苯甲酰苯胺 (3',4'-diethylbenzanilide)

N-酰基也可以作为胺的*N*-取代基进行命名。该方法主要用于含氮杂环的*N*-衍生物的命名。

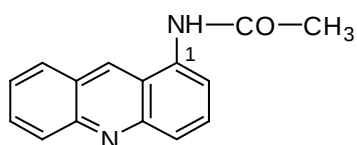
例：



1-乙酰基-1,2,3,4-四氢喹啉 (1-acetyl-1,2,3,4-tetrahydroquinoline)

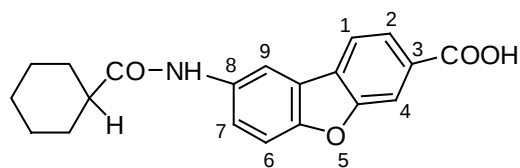
当存在有优先作为主特性基团的基团时，*N*-取代酰胺‘*R*-CO-NH-*R*’中的基团‘*R*-CO-NH-’可以表述为化合物‘*HR*’的一个取代基。命名时，可以将‘*R*-CO-NH-’作为取代基，将原酰胺名称中的后缀‘-酰胺(-amide)’、‘-甲酰胺(-carboxamide)’分别替换为‘酰胺基-(amido-)’、‘甲酰胺基-(carboxamide-)’或者恰当的‘酰基氨基acylamino-’前缀。

例：



1-乙酰氨基吡啶 (1-Acetamidoacridine)

1-(乙酰基氨基)吡啶 (1-(Acetylamino)acridine)



8-(环己烷甲酰胺基)二苯并呋喃-3-甲酸

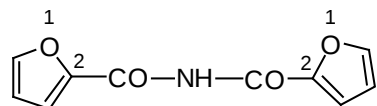
(8-(Cyclohexanecarboxamido)dibenzofuran-3-carboxylic acid)

8-[(环己烷羰基)氨基]二苯并呋喃-3-甲酸

(8-[(Cyclohexanecarbonyl)amino]dibenzofuran-3-carboxylic acid)

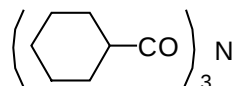
6.5.8.2 氨的对称的二酰基或三酰基衍生物，即 ‘(R-CO)₂NH’ 和 ‘(R-CO)₃N’，可分别作为母体氮氢化合物 (azane) 的二酰基或三酰基衍生物或者作为二酰胺或三酰胺进行命名。

例：



二呋喃-2-甲酰基氮烷 (Di-2-furoylazane)

二呋喃-2-甲酰胺 (Di-2-furoylamine)



三(环己烷羰基)氮烷 (Tris(cyclohexanecarbonyl)azane)

三(环己烷甲酰胺)胺 Tris(cyclohexanecarbonyl)amine

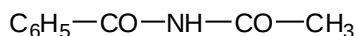
英文中二乙酰胺 (diacetamide (CH₃-CO)₂NH) 和三乙酰胺 (triacetamide (CH₃-CO)₃N)，二苯甲酰胺 (dibenzamide (C₆H₅-CO)₂NH) 和三苯甲酰胺 (tribenzamide (C₆H₅-CO)₃N) 为保留使用的俗名，但不能用于它们取代衍生物的命名。中文中均为系统命名。

不对称的氨的二酰基或三酰基衍生物，如 R-CO-NH-CO-R’，R-N(CO-R’)₂ 和 R-CO-N(CO-R’)(CO-R’’)，可以采用三种不同的命名方式：

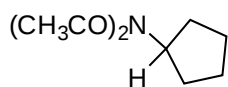
- (a) 基于氮母体氢化物进行命名；
- (b) 作为二酰胺，二酰基烷基（芳基）胺或者三酰胺进行命名；
- (c) 作为单酰胺（参见6.5.8.1.节）、二乙酰胺、或二苯甲酰胺的烷基（或芳基等）、或

酰基衍生物进行命名。

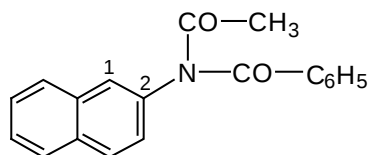
例：



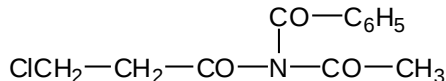
- (a) 乙酰基(苯甲酰基)氮烷 (Acetyl(benzoyl)azane)
- (b) 乙酰(苯甲酰)胺 (Acetyl(benzoyl)amine)
- (c) *N*-乙酰基苯甲酰胺 (*N*-Acetyl benzamide)



- (a) 二乙酰基(环戊基)氮烷 (Diacetyl(cyclopentyl)azane)
- (b) 二乙酰(环戊基)胺 (Diacetyl(cyclopentyl)amine)
- (c) *N*-环戊基二乙酰胺 (*N*-Cyclopentyl diacetamide)



- (a) 乙酰基(苯甲酰基)萘-2-基氮烷 (Acetyl(benzoyl)-2-naphthylazane)
- (b) 乙酰(苯甲酰)萘-2-胺 (Acetyl(benzoyl)-2-naphthylamine)
- (c) *N*-乙酰基-*N*-(萘-2-基)苯甲酰胺 (*N*-Acetyl-*N*-(2-naphthyl)benzamide)

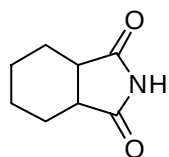


- (a) 乙酰基(苯甲酰基)(3-氯丙酰基)氮烷 (Acetyl(benzoyl)(3-chloropropanoyl)azane)
- (b) 乙酰基(苯甲酰基)(3-氯丙酰基)胺 (Acetyl(benzoyl)(3-chloropropanoyl)amine)
- (c) *N*-乙酰基-*N*-(3-氯丙酰基)苯甲酰胺 (*N*-Acetyl-*N*-(3-chloropropanoyl)benzamide)

6.5.8.3. 二酰亚胺 (Imides)

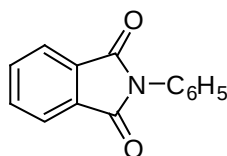
酰亚胺指的是包含‘-CO-NH-CO-’结构的化合物，它们可以看做是羧酸酐的氮类似物，也可以看做是氨的二酰基衍生物。无环酰亚胺的命名参见6.5.8.2.节。环状酰亚胺在命名时将其相应二元基础羧酸的后缀‘-二酸(-dioic acid)’、‘-酸(-ic acid)’或‘-二甲酸(-dicarboxylic acid)’替换为‘-二酰亚胺(-imide)’或‘-二甲酰亚胺(-dicarboximide)’即可。也可作为杂环对其进行命名。

例：



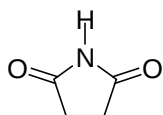
环己烷-1,2-二甲酰亚胺 (Cyclohexane-1,2-dicarboximide)

八氢异吲哚-1,3-二酮 (Octahydroisoindole-1,3-dione)



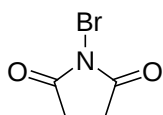
N-苯基邻苯二甲酰亚胺 (*N*-Phenylphthalimide)

2-苯基-2,3-二氢-1*H*-异吲哚-1,3-二酮 (2-Phenyl-2,3-dihydro-1*H*-isoindole-1,3-dione)



琥珀酰亚胺, 丁二酰亚胺 (succinimide)

四氢吡咯-2,5-二酮 (pyrrolidine-2,5-dione)



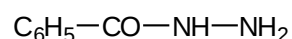
N-溴代琥珀酰亚胺 (*N*-bromosuccinimide) (IUPAC-2004 建议不采用此命名, 因琥珀酰亚胺上不允许加上取代基名称, 但此名称, 尤其是它的缩略词NBS早已习惯使用)

1-溴代四氢吡咯-2,5-二酮 (1-bromopyrrolidine-2,5-dione)

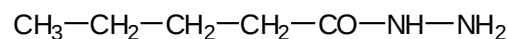
6.5.8.4 酰肼 (Hydrazides)

酰肼是母体氢化物乙氮烷 (diazane) (肼 (hydrazine)) $\text{NH}_2\text{-NH}_2$ 的单酰基衍生物, 命名时将相应酸名称中的后缀 ‘-酸 (-ic acid, -oic acid)’ 替换为 ‘-酰肼 (-ohydrazide)’, 或者将 ‘-甲酸 (-carboxylic acid)’ 替换为 ‘-甲酰肼 (-carbohydrazide)’ 即可。

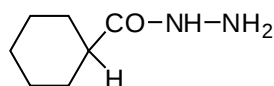
例:



苯甲酰肼 (Benzohydrazide)



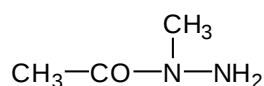
戊酰肼 (Pentanohydrazide, Pentanehydrazide)



环己烷甲酰肼 (Cyclohexanecarbohydrazide)

若酰肼结构中氮原子上的氢被其它烷基、芳基或环烷基等取代, 命名时与氮叉基上氮原子相连的取代基加上前缀 ‘*N*-’ 或 ‘1’-’, 与氨基氮相连的取代基加上前缀 ‘*N*’-’ 或 ‘2’-’。酰肼衍生物也可以作为母体氢化物乙氮烷 (肼) 的衍生物进行命名。

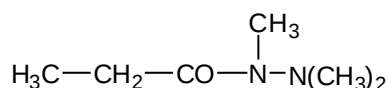
例:



N-甲基乙酰肼 (*N*-Methylacetohydrazide)

1'-甲基乙酰肼 (1'-Methylacetohydrazide)

1-乙酰基-1-甲基乙氮烷 (肼) (1-Acetyl-1-methyldiazane(hydrazine))



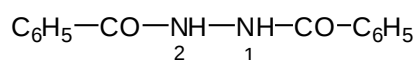
N,N,N'-三甲基丙酰肼 (*N,N,N'*-Trimethylpropionohydrazide)

1',2',2'-三甲基丙酰肼 (1',2',2'-Trimethylpropionohydrazide)

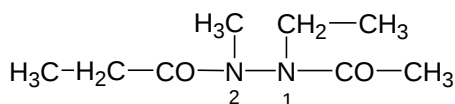
1,1,2-三甲基-2-丙酰基乙氮烷 (肼) (1,1,2-Trimethyl-2-propionyldiazane (hydrazine))

酰肼的二酰基、三酰基、四酰基衍生物可以基于母体氢化物乙氮烷 (肼) 进行命名。

例:



1,2-二苯甲酰基乙氮烷 (肼) (1,2-Dibenzoyldiazane (hydrazine))

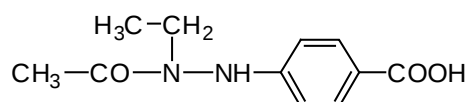


1-乙酰基-1-乙基-2-甲基-2-丙酰基乙氮烷 (肼)

(1-Acetyl-1-ethyl-2-methyl-2-propionyldiazane (hydrazine))

当结构中存在更优先的特性基团时, 可将酰肼以前缀 ‘酰乙氮烷 (肼) 基- (acyldiazanyl- (acylhydrazino-))’ 来表述。酰肼基中的位次编号规定为: 与自由价态位置相连的氮原子编号为 ‘*N*-’ 或1-, 另一氮原子编号为 ‘*N*'-’或2-。连在链末端或环上的甲酰肼基团 (-CO-NHNH₂) 则可以前缀 ‘甲酰肼基- (carbonohydrazidoyl-)’ ‘肼基羰基- (hydrazinecarbonyl-)’ 或 ‘肼基-氧亚基 (hydrazinyl-oxo-)’ 来表述。

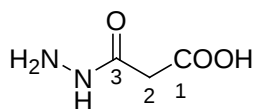
例:



4-(2-乙酰基-2-乙基乙氮烷基)苯甲酸 (4-(2-Acetyl-2-ethyl diazanyl)benzoic acid)

4-(*N'*-乙酰基-*N'*-乙基肼基)苯甲酸 (4-(*N'*-Acetyl-*N'*-ethylhydrazino)benzoic acid)

4-(2-乙酰基-2-乙基肼基)苯甲酸 (4-(2-Acetyl-2-ethylhydrazino)benzoic acid)



2-甲酰肼基乙酸 (2-carbonohydrazidoacetic acid)

2-肼基羰基乙酸 (2-hydrazinecarbonylacetic acid)

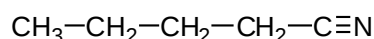
3-肼基-3-氧亚基丙酸 (3-hydrazinyl-3-oxopropanoic acid)

6.5.9 腈、异腈及其相关化合物 (Nitriles, isocyanides and related compounds)

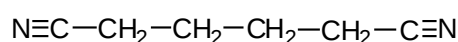
6.5.9.1 腈 (Nitriles)

腈指的是含有 ‘ $R-C\equiv N$ ’ 结构的一类化合物，也称作 ‘氰化物 (cyanides)’。腈的命名方式与酸和其它相关化合物命名方式类似。对于无环的单腈或二腈，可以看做是酸的羧基 (-COOH) 被氰基 (-C $\equiv$ N) 取代，命名时将相应羧酸的后缀 ‘-酸 (-oic acid)’ 或 ‘-二酸 (-dioic acid)’ 替换为 ‘-腈 (-nitrile)’ 或 ‘-二腈 (-dinitrile)’ 即可。

例：



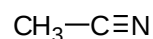
戊腈 (Pentanenitrile)



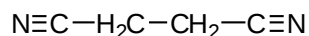
己二腈 (Hexanedinitrile)

对于采用俗名命名的羧酸，其羧基被氰基取代后所得到的腈类化合物，命名时将相应羧酸俗名中词尾 ‘-酸 (-ic acid, -oic acid)’ 替换为 ‘-腈 (-onitrile)’。

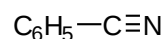
例：



乙腈 (Acetonitrile) (中文为系统命名)



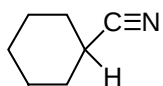
琥珀腈 (Succinonitrile)



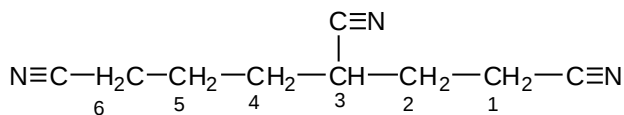
苯腈 (Benzonitrile)

可看做是氰基取代羧酸中羧基得到的腈类化合物，若原羧酸名称以 ‘-甲酸 (-carboxylic acid)’ 结尾，则相应腈类化合物命名时用 ‘甲腈 (-carbonitrile)’ 替换 ‘甲酸 (-carboxylic acid)’ 即可。

例：



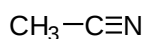
环己烷甲腈 (Cyclohexanecarbonitrile)



己烷-1,3,6-三甲腈 (Hexane-1,3,6-tricarbonitrile)

含有‘ $\text{R}-\text{C}\equiv\text{N}$ ’结构的腈类化合物，其官能类别名的组成为：先给出基团R的名称，后面紧跟类别名‘氰化物 (cyanide)’，‘氰化物’包括 $-\text{C}\equiv\text{N}$ 基团中的碳原子，此不同于‘腈’不包括其中的碳原子。含有‘ $\text{R}-\text{CO}-\text{C}\equiv\text{N}$ ’或‘ $\text{R}-\text{SO}_2-\text{C}\equiv\text{N}$ ’结构的化合物的命名方式类似。

例：



甲基氰化物 (Methyl cyanide)；乙腈 (Acetonitrile) —取代操作法命名



丙-1,3-二基二氰化物 (Propane-1,3-diyl dicyanide)；戊二腈 (Pentanedinitrile) —取代操作法命名



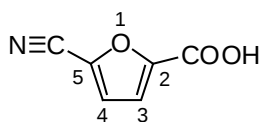
苯甲酰(基)氰化物 (Benzoyl cyanide)



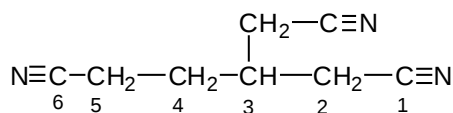
苯磺酰(基)氰化物 (Benzenesulfonyl cyanide)

当存在更优先的主特性基团时，或者不能将所有的‘ $-\text{C}\equiv\text{N}$ ’基团均表述为主特性基团时，可将‘ $-\text{C}\equiv\text{N}$ ’基团在命名中作为前缀‘氰基- (cyano-)’处理。

例：



5-氰基呋喃-2-甲酸 (5-Cyano-2-furoic acid, 5-Cyanofuran-2-carboxylic acid)



3-(氰基甲基)己二腈 (3-(Cyanomethyl)hexanedinitrile)

6.5.9.2 与氰化物相关的化合物

表6-5-6 第一列中含X基团的腈类似物的命名方法与卤代物的命名方式类似（参见6.1.1节）。作为词尾时用表6-5-6 第二列所示的词尾替换卤代物的词尾‘卤化物(halide)’；作为前缀时用表6-5-6 第三列所示的前缀替换卤代物的前缀‘卤代- (halo-)’。

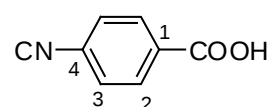
表6-5-6. 氰化物与相关基团（按官能团（特性基团）排列中的高位次序递减方式排列）

化合物RX中的X	官能团类别名中的后缀和词尾	前缀
-CN	氰化物 (cyanide)	氰基- (Cyano-)
-NC	异氰化物 (isocyanide)	异氰基- (Isocyano-)
-OCN	氰酸酯 (盐) (cyanate)	氰氧基- (Cyanato-)
-NCO	异氰酸酯 (盐) (isocyanate)	异氰氧基- (Isocyanato-)
-C≡N=O	腈氧化物 (Nitrile oxide)	氧氰基-, (氧亚基-λ ⁵ -氮次基)甲基- ((oxo-λ ⁵ -azanylidyne)methyl-)
(-ON≡C) *	(雷酸盐 (fulminate)) *	氧氰基- (Fulminato-) *
-SCN	硫氰酸酯 (盐) (thiocyanate)	氰硫基- (Thiocyanato-)
-NCS	异硫氰酸酯 (盐) (isothiocyanate)	异氰硫基- (Isothiocyanato-)
-SeCN	硒氰酸酯 (盐) (selenocyanate)	氰硒基- (Selenocyanato-)
-NCSe	异硒氰酸酯 (盐) (isoselenocyanate)	异氰硒基- (isoselcnocyanato-)

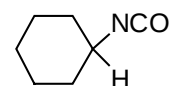
*对腈氧化物曾认为的结构和因此命名用的前后缀，现不建议使用。雷酸盐一词见无机化学命名。

例：

$\text{C}_6\text{H}_5\text{—NC}$
苯异氰化物 (Phenyl isocyanide)



4-异氰基苯甲酸 (4-Isocyanobenzoic acid)



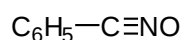
异氰酸环己酯 (Cyclohexyl isocyanate)

6.5.9.3. 腈氧化物 (Nitrile oxides)

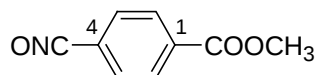
含有‘ $\text{R—C}\equiv\text{NO}$ ’结构的化合物称为腈氧化物，其实应是一两性离子($\text{R—C}\equiv\text{N}^+\text{—O}^-$)。

在某些特殊情况下，‘氧化物’三字可放在腈名称的后面，而不是放在氰化物名称的后面。作前缀时用‘氧氰基-’，或‘(氧亚基- λ^5 -氮次基)甲基- ((oxo- λ^5 -azanylidyne)methyl-)’。

例：



苯甲腈氧化物 (Benzonitrile oxide)



4-氧氰基苯甲酸甲酯，4-[(氧亚基- λ^5 -氮次基)甲基]苯甲酸甲酯
(methyl 4-[(oxo- λ^5 -azanylidene)methyl]benzoate)

6.6. 14~16 族元素有机化合物和金属有机化合物 (Organic compounds of the Group 14~16 and organometallic compounds)

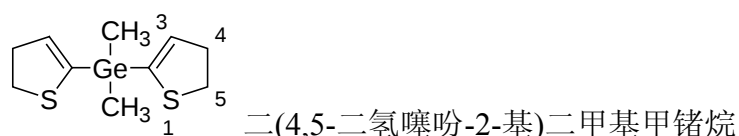
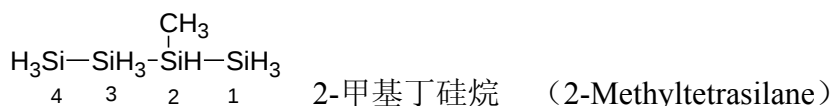
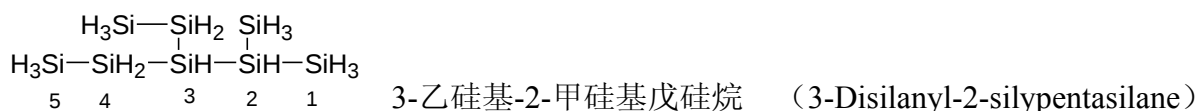
本章前面几节提出了 13~17 族元素有机化合物通用的，按特性基团类型的命名原则，但每一族元素的有机化合物还会有其共性的命名方式，下面将就各族元素母体氢化物的命名方式分别作一简要介绍。13 族硼化合物的命名习惯上归属无机化合物命名规则中，故未列入；17 族卤素有机化合物的命名方式已在前面章节提及，基于卤素母体氢化物命名的场合也较为罕见，因此也不再介绍。本节第四部份为金属有机化合物的基本命名规则。

6.6.1. 14 族元素母体氢化物

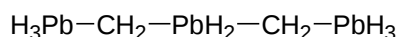
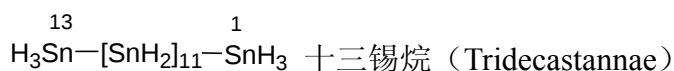
烃，碳的氢化物是有机化合物的主体，是前面各章节命名原则涉及的主要对象，因此本节仅考虑 14 族其它元素氢化物的命名。

6.6.1.1. 14 族元素的烃类似物称硅烷 (silane)，锗烷 (germane)，锡烷 (stannane) 和铅烷 (plumbane)，按相应的烃进行命名。

例：



(Bis(4,5-dihydrothiophen-2-yl)dimethylgermane)

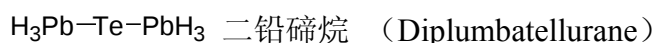
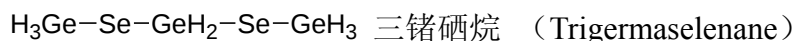
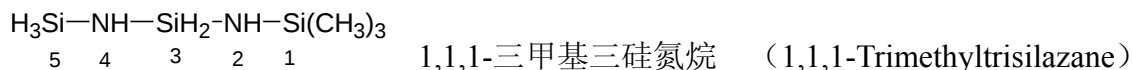
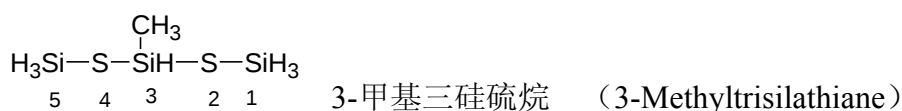
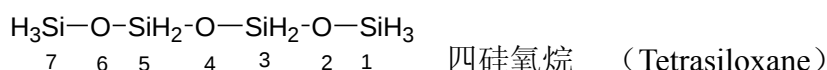


[甲铅烷叉基二(甲叉基)]甲铅烷 ([Plumbanediylbis(methylene)]bis(plumbane))

二(甲铅烷基甲基)甲铅烷 (Bis(plumbylmethyl)plumbane)

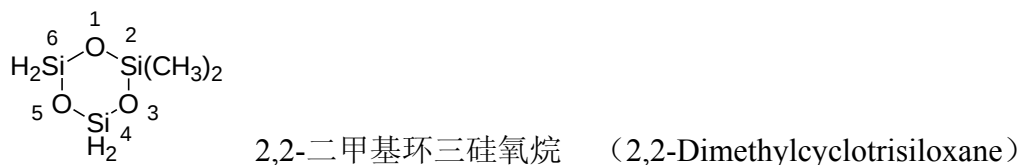
6.6.1.2. 杂混硅母体氢化物：硅氧烷和其类似物 具有通式 $\text{SiH}_3-[\text{O}-\text{SiH}_2]_n-\text{O}-\text{SiH}_3$ 的硅化合物称‘硅氧烷’ (siloxane)，按其链上硅原子的数目 ($n+2$) 称此母体氢化物为‘二硅氧烷’ (disiloxane)、‘三硅氧烷’ (trisiloxane) 等。硫、硒、碲和饱和的氮类似物以同样的方式分别命名为‘硅硫烷’ (silathiane)、‘硅硒烷’ (silaselenane)、‘硅碲烷’ (silatellurane) 和‘硅氮烷’ (silazane)。锗、锡和铅的类似氢化物也按此方式进行命名。

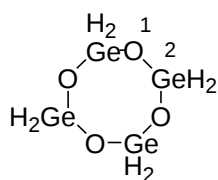
例：



具有通式 $\left[\text{O}-\text{SiH}_2 \right]_n$ 的单环硅氧化合物，按其硅原子的数目 (n) 称‘环三硅氧烷’ (cyclotrisiloxane)，‘环四硅氧烷’ (cyclotetrasiloxane) 等。硫、硒、碲和饱和的氮类似物可相应地命名为‘环硅硫烷’ (cyclosilathiane)，‘环硅硒烷’ (cyclosilselenane) 等。锗、锡和铅的相应化合物也可类似命名。

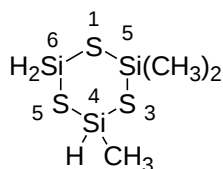
例：



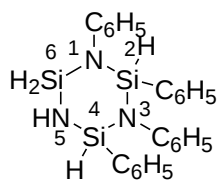


环四锗氧烷 (Cyclotetragermoxane)

1,3,5,7,2,4,6,8-四氧四锗环庚烷 (1,3,5,7,2,4,6,8-Tetraoxatetragermocane)
(按 Hantzsch-Widman 杂环命名法)



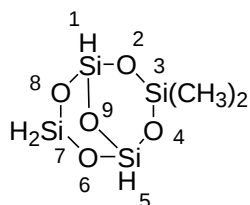
2,2,4-三甲基环三硅硫烷 (2,2,4-Trimethylcyclotrisilathiane)



1,2,3,4-四苯基环三硅氮烷 (1,2,3,4-Tetraphenylcyclotrisilazane)

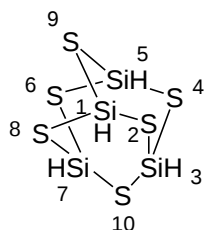
双环和多环的硅氧烷、硅硫烷、硅硒烷、硅碲烷和硅氮烷的命名采用与环烃相似的环系表示方式，如双环[3.3.1]，螺环[5.7]等作为前缀，后加硅原子数和相应的硅氧烷等字缀。必要时可加前缀 *ISi*-或 *IN*-来标明 1-位（桥头）原子是硅还是氮。

例：

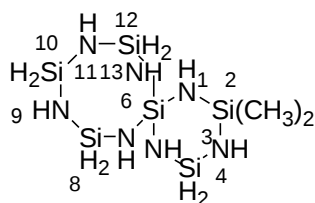


3,3-二甲基双环[3.3.1]四硅氧烷

(3,3-Dimethylbicyclo[3.3.1]tetrasiloxane)

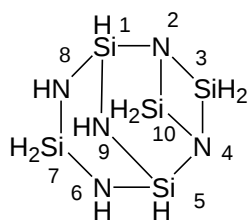


三环[3.3.1.1^{3,7}]四硅硫烷 (Tricyclo[3.3.1.1^{3,7}]tetrasilathiane)

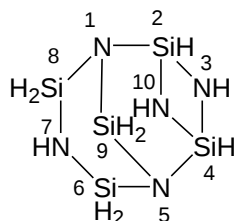


2,2-二甲基螺环[5.7]六硅氮烷

(2,2-Dimethylspiro[5.7]hexasilazane)



1Si-三环[3.3.1.1^{2,4}]五硅氮烷 (*1Si*-Tricyclo[3.3.1.1^{2,4}]pentasilazane)

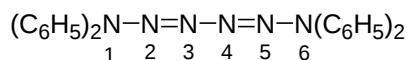


1N-三环[3.3.1.1^{2,4}]五硅氮烷 (*1N*-Tricyclo[3.3.1.1^{2,4}]pentasilazane)

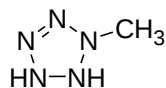
6.6.2. 15 族元素的氢化物

6.6.2.1. 氮氢化物的衍生物可命名为胺，酰胺，亚胺或酰肼（参见 6.2 和 6.5.8 节），或者也可从氮母体氢化物出发用取代法进行命名。

例：



1,1,6,6-四苯基己氮-2,4-二烯 (1,1,6,6-Tetraphenylhexaaza-2,4-diene)



3-甲基环戊氮-1-烯 (3-Methylcyclopentaa-1-ene)

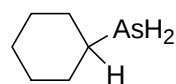
1-甲基-2,3-二氢-1*H*-五唑 (1-Methyl-2,3-dihydro-1*H*-pentazole)

6.6.2.2. 三价磷、砷、锑、铋的有机衍生物可从相应母体氢化物出发用取代法进行命名。

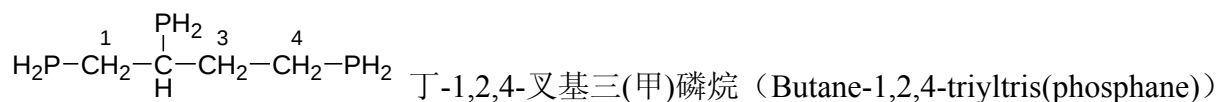
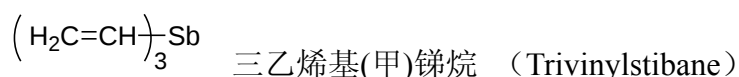
磷、砷、锑、铋的母体氢化物称磷烷 (Phosphane)、砷烷 (Arsane)、锑烷 (Stibane) 和铋烷 (Bismuthane)，但习惯上也在使用另一系列的英文名 Phosphine、Arsine、Stibine 和 Bismuthine，对此前二者中文曾译为膦和胂。1993 年 IUPAC 有机化学名词委称不鼓励使用后一系列的用词，本建议对基元磷烷 (Phosphane) 和砷烷 (Arsane) —PH₃ 和 AsH₃ 的烃基取代物可继续使用膦和胂命名外，其它场合也不鼓励使用膦和胂。

例：

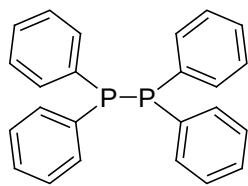
H₃C-CH₂-PH₂ 乙基(甲)磷烷 (乙基膦) (Ethylphosphane)



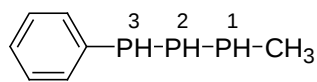
环己基(甲)砷烷 (环己基胂) (Cyclohexylarsane)



丁-1,2,4-叉基三(甲)膦 (Butane-1,2,4-triyltris(phosphine))



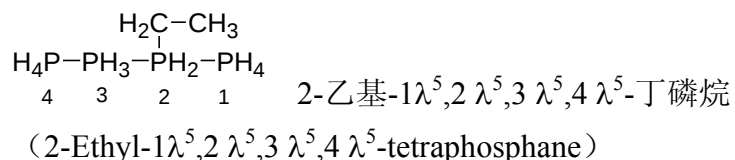
四苯基乙磷烷 (Tetraphenyldiphosphane)



1-甲基-3-苯基丙磷烷 (1-Methyl-3-phenyltriphosphane)

6.6.2.3. 五价磷、砷、锑、铋的母体氢化物称 λ^5 -磷烷(λ^5 -Phosphane)、 λ^5 -砷烷(λ^5 -Arsane)、 λ^5 -锑烷(λ^5 -Stibane)和 λ^5 -铋烷(λ^5 -Bismuthane)，英文也有用另外专用的名词，如 Phosphorane 和 Arsorane，但建议优先采用前者加 λ^5 -的用法。

例：



6.6.3. 16 族元素的氢化物

连续三个及三个以上的 16 族元素衍生物可在它们相应的母体氢化物基础上，按取代法进行命名。连续三个以下的 16 族元素衍生物命名参见 6.3 节。

6.6.3.1. 单一 16 族元素的母体氢化物及其衍生的取代基

按氧烷(oxidane)、硫烷(sulfane)、硒烷(selane)、碲烷(tellane)命名相应的母体氢化物。为免于混淆，中文中命名基时氧烷、硫烷等基前的烷字不可省略。

例：

$\text{H}_3\text{C}-\text{O}-\text{O}-\text{O}-\text{CH}_3$ 二甲基丙氧烷 (Dimethyltrioxidane)

$\text{HO}-\text{SO}_2-\text{S}-\text{S}-\text{S}-\text{SO}_2-\text{OH}$ 丙硫烷二磺酸 (Trisulfanedisulfonic acid), 戊硫代酸 (Pentathionic acid) — 俗名

$\text{C}_6\text{H}_5-\text{Se}-\text{Se}-\text{Se}-\text{CH}_3$ 1-甲基-3-苯基丙硒烷, 甲基(苯基)丙硒烷
(1-Methyl-3-phenyltriselenane, Methyl(phenyl)triselenane)

$\text{H}_3\text{C}-\text{Te}-\text{Te}-\text{Te}-\text{Te}-\text{SH}$ 甲基丁碲烷硫醇 (Methyltetratellaneethiol)

$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{Se}-\text{Se}-\text{Se}-\text{CH}_3$ 1-(甲基丙硒烷基)丙-1-酮 (1-(Methyltriselenanyl)propan-1-one)

6.6.3.2. 混合 16 族元素的母体氢化物及其衍生的取代基

$\text{a}(\text{ba})_x$ 型的母体氢化物按 3.2.3.2 节的方法命名, 即采用端原子的数目和名称为词头, 另一原子名称为词尾, 但不适用于氧为端原子。

例:

$\text{HS}-\text{O}-\text{SH}$ 二硫氧烷 (Dithioxane)

$\text{C}_6\text{H}_5-\text{S}-\text{O}-\text{S}-\text{CH}_3$ 1-甲基-3-苯基二硫氧烷 (1-Methyl-3-phenyldithioxane)

$\text{HO}-\text{S}-\text{O}-\text{S}-\text{OH}$ 二硫氧烷二醇 (Dithioxanediol)

当连续 16 族元素原子化合物的端基为氢原子时, 可以其元素烷的名称 (氧烷除外) 作为母体氢化物进行命名; 端基为有机基团时, 则可以有机基团为母体按取代法命名, 视情况也可按 16 族元素烷为母体进行命名。

例:

$\text{H}-\text{O}-\text{O}-\text{S}-\text{O}-\text{H}$ (过氧羟基)甲硫烷醇 ((Hydroperoxy)sulfanol)
不能称 乙氧烷-SO-硫代过氧醇 (dioxidane-SO-thioperoxol)

$\text{H}-\text{O}-\text{O}-\text{S}-\text{S}-\text{H}$ 乙硫烷过氧醇 (Disulfaneperoxol)
不能称 乙氧烷(二硫代过氧醇) (dioxidane(dithioperoxol))

$\text{H}_3\text{C}-\text{O}-\text{S}-\text{O}-\text{CH}_3$ [(甲氧基甲硫烷基)氧基]甲烷 ([Methoxysulfanyl]oxy)methane)
(甲基-OSO-硫代三氧基)甲烷 ((Methyl-OSO-thiotrioxo)methane)
二甲氧基甲硫烷 (Dimethoxysulfane)

6.6.4. 有机金属化合物

虽然许多金属有机化合物是以分子缔合形式存在或含有结构性溶剂, 但它们的命名时通常仅考虑化合物本身的化学组成, 溶剂如有存在的话则忽略不计。

例:

$(\text{C}_4\text{H}_9\text{Li})_n$ 丁基锂 (Butyllithium)

$[(\text{C}_2\text{H}_5)_3\text{Al}]_2$ 三乙基铝 (Triethylaluminium)

6.6.4.1. 铋、铊、锗、锡和铅金属有机化合物

这些金属有机化合物采用由相应母体氢化物出发的取代方式进行命名。

例:

$(\text{C}_2\text{H}_5)_3\text{Bi}$ 三乙基(甲)铋烷 (Triethylbismuthane)

$(\text{C}_6\text{H}_5)_4\text{Pb}$ 四苯基(甲)铅烷 (Tetraphenylplumbane)

$(\text{C}_6\text{H}_5)_2\text{SnH}_2$ 二苯基(甲)锡烷 Diphenylstannane

$(\text{C}_6\text{H}_5)_2(\text{C}_2\text{H}_5)(\text{CH}_3)\text{Ge}$ 乙基(甲基)二苯基(甲)锗烷 (Ethyl(methyl)diphenylgermane)

$(\text{CH}_3)_5\text{Sb}$ 五甲基- λ^5 -(甲)铋烷 (Pentamethyl- λ^5 -stibane (Pentamethylstiborane))

6.6.4.2. 金属仅与氢和有机基团的碳相连的金属有机化合物

此时命名采用有机基团名和氢化为前缀,再以金属名为词根而组成,金属有氢相连时必须在金属名前加氢化标明。对铋、铊、锗、锡和铅金属有机化合物则优先采用以相应元素母体氢化物出发的取代方式命名(见上节),此时则无需另外标明与金属相连的氢。

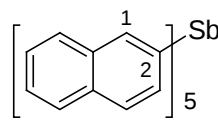
例:

$(\text{CH}_3\text{Li})_n$ 甲基锂 (Methylolithium)

$\text{CH}_2=\text{CHNa}$ 乙烯基钠 (Vinylsodium)

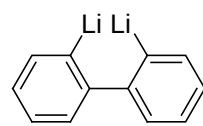
$(\text{C}_4\text{H}_9)_3\text{GeH}$ 三丁基氢化锗 (Tributylhydridogermanium)

三丁基(甲)锗烷 (Tributylgermane) (首选名) (见上节)

 五萘-2-基铋 (Penta-2-naphthylantimony)

五萘-2-基- λ^5 -(甲)铋烷 (Penta-2-naphthyl- λ^5 -stibane) (首选名) (见上节)

五萘-2-基(甲)铋烷 (Penta-2-naphthylstiborane) (见上节)

 联苯-2,2'-叉基二锂 (Biphenyl-2,2'-diyl dilithium)

$\text{C}_2\text{H}_5\text{BeH}$ 乙基氢化铍 (Ethyldihydridoeryllium)

$(\text{C}_6\text{H}_5)(\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2)\text{AuH}$ 苯基苄基氢化金 (Benzylhydridophenylgold)

6.6.4.3. 带负离子配体的金属有机化合物

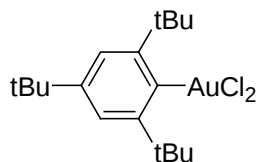
在英文中此时的命名为先有机基团的名称，再金属的名称，再加空格后为负离子配体的名称；也可按无机化合物的命名方式，将所有连接在金属上的有机基团、氢和负离子配体基团的名称按字母顺序排列在金属名称前。中文建议采用使用连缀字‘化’的加合方式命名，即负离子配体基团的名称在前，加‘化’后接有机基团名称，最后为金属名称，金属有氢相连时在金属名前加氢化标明。

例：

$(\text{CH}_3\text{MgI})_n$ 碘化甲基镁 (Methylmagnesium iodide, Iodo(methyl)magnesium)

$(\text{C}_6\text{H}_5)_2\text{SbCl}$ 氯二苯基(甲)锑烷，氯化二苯基锑 (Chlorodiphenylstibane, Diphenylantimony chloride, Chlorodiphenylantimony)

$\text{C}_6\text{H}_5\text{HgOAc}$ 乙酸苯(基)汞 (Phenylmercury acetate, Acetato(phenyl)mercury)



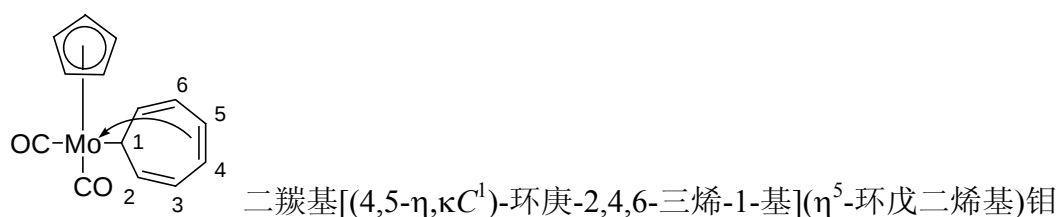
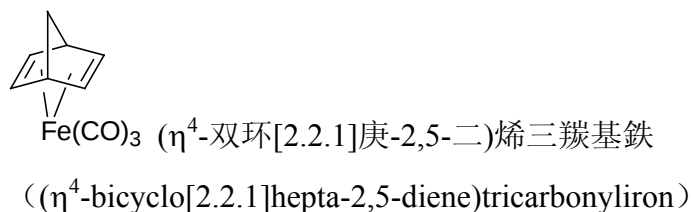
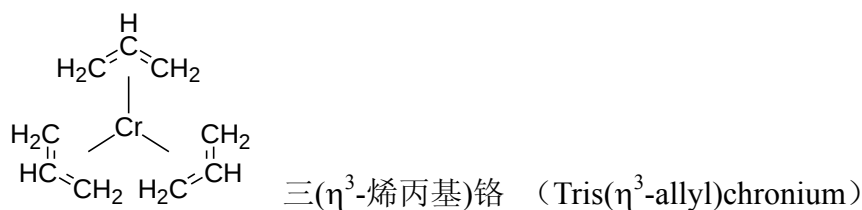
二氯化(2,4,6-三叔丁基苯(基))金，二氯(2,4,6-三叔丁基苯(基))- λ^3 -金烷 ((2,4,6-Tris-*t*-butylphenyl)gold dichloride, Dichloro(tri-*t*-butylphenyl)gold, Dichloro((tri-*t*-butylphenyl)- λ^3 -aurane)

$\text{CH}_3\text{SnH}_2\text{Cl}$ 氯(甲基)(甲)锡烷，氯化甲基二氢化锡 (Chloro(methyl)stannane, Methyltin chloride dihydride, Dihydridomethyltin chloride, Chlorodihydridomethyltin)

6.6.4.4. 与碳原子以多中心键连的金属有机化合物

此类化合物命名时，将以多中心键连金属的有机配体体系（如不饱和体系）的名称前加前缀‘ η ’ (eta)，该体系中与金属键连的原子数标在‘ η ’的右上方。如并非该不饱和体系所有原子均键连于金属，则将键连原子的位次标注在‘ η ’前。如在配体中有原子直接与金属成键者，则可以希腊字母‘ κ ’ (kappa)加该原子元素符号及位次上标标识。

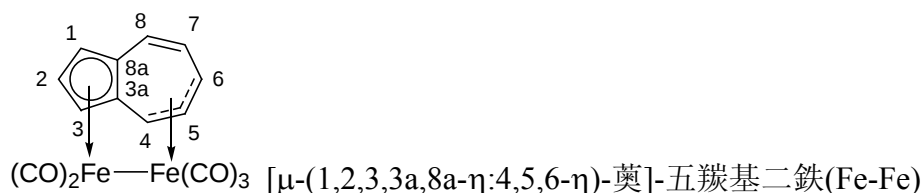
例：



(Dicarbonyl[(4,5-η,κC¹)-cyclohepta-2,4,6-trien-1-yl](η⁵-cyclopentadienyl)molybdenum)

桥联的多中心键连金属有机化合物命名时以前缀 ‘μ’ 标识金属桥，各组 ‘η’ 的标识间用分号分开。

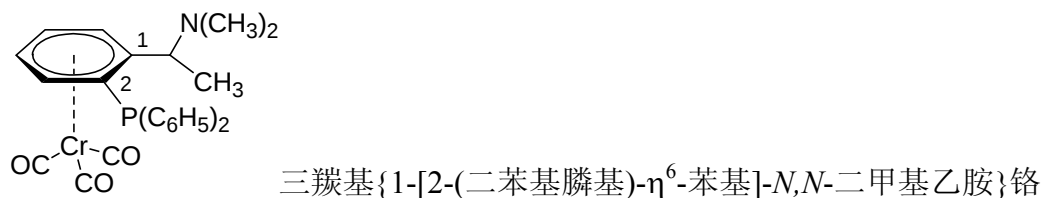
例：



([μ-(1,2,3,3a,8a-η:4,5,6-η)-azulene]-pentacarbonyldiiron(Fe-Fe))

有机配体上的取代衍生物按取代法进行命名。

例：

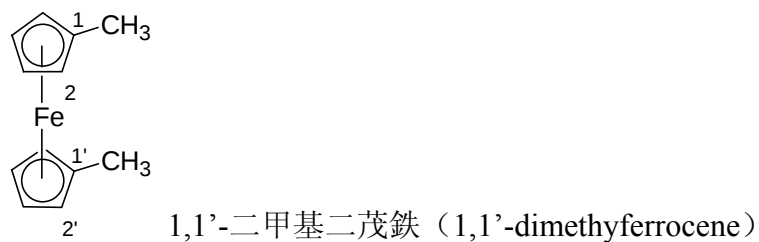


(Tricarbonyl{1-[2-(diphenylphosphanyl)-η⁶-phenyl]-N,N-dimethylethanamine}chromium)

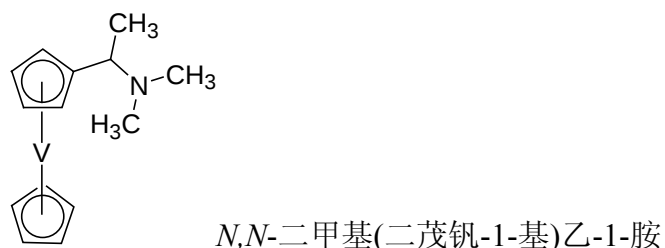
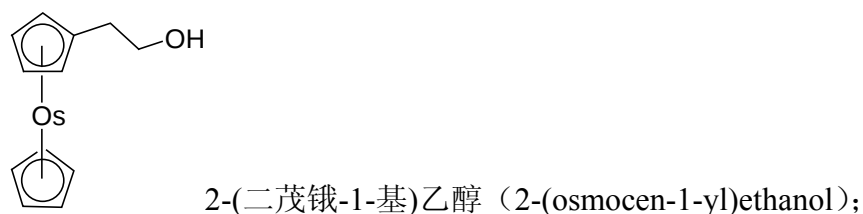
茂金属 (metallocenes) 是多中心键连金属有机化合物中较独特的一类，是双(η⁵-环戊二烯基)与一些金属的化合物(配合物)，包括二茂铁(ferrocene)，二茂钌(ruthenocene)，二茂钼(osmocene)，二茂镍(nickelocene)，二茂铬(chromocene)，二茂钴(cobaltocene)，二茂钒(vanadocene)等。它们环戊二烯基上取代的衍生物可以二茂金属名为母体氢化

物，按取代法进行命名。二个环上的位次可用加撇加以区别。

例：

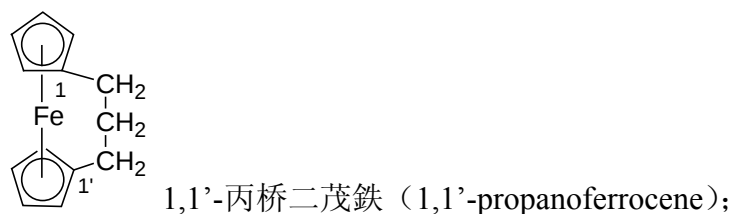


羧基二茂铁 (carboxyferrocene)



(N,N-dimethyl(vanadocen-1-yl)ethan-1-amine);

1-[1-(二甲基氨基)乙基]二茂钒 (1-[1-(dimethylamino)ethyl]vanadocene)



1(1,1')-二茂铁杂环四蕃 (1(1,1')-ferrocenacyclotetraphane)

6.7. 自由基和离子 (Radicals and Ions)

IUPAC 对自由基、离子和相关种类命名的详细建议原文见：‘Revised Nomenclature of Radicals, Ions, Radical Ions and Related Species. *Pure Appl. Chem.* **1993**, **65**, 1357-1455.’

6.7.1. 自由基

6.7.1.1. 一价自由基

形式上通过从任何一个碳族元素的单核母体氢化物,或者从饱和直链无环烃的末端原子,或者从单环烃环的任何位置移除一个氢原子而形成的自由基,英文中可通过用”yl”替换母体氢化物系统名称的词尾”-ane”来命名,相应地中文中以“-基自由基”代替母体氢化物名称的词尾“烷”来命名,也即在母体氢化物基名称后加词尾“-自由基”来命名。(修订建议:中文词尾“-基自由基”在不至于混淆的情况下,其中第一个‘基’字可省略)

例:



甲基自由基 (Methyl (radical))



甲锗烷基自由基 (Germyl (radical))



丙基自由基 (Propyl (radical))



环丁基自由基 (Cyclobutyl (radical))

形式上从任何其他母体氢化物的任何位置上移除一个氢原子而形成的自由基,可通过在母体氢化物的末尾加上后缀“-基自由基”(“-yl”)来命名。(英文的命名法:如果母体氢化物名称的末尾字母是 e,则需将 e 去掉后加”yl”。)

例:

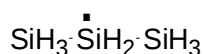


硫烷基自由基 (Sulfanyl)

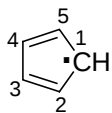


氮烷基自由基 (Azanyl)

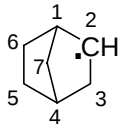
氨基自由基 (Aminyl)



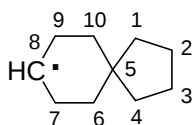
三硅烷-2-基自由基 (Trisilan-2-yl)



环-戊-2,4-二烯-1-基自由基 (Cyclopenta-2,4-dien-1-yl)



双环[2.2.1]庚-2-基自由基 (Bicyclo[2.2.1]heptan-2-yl)



螺[4.5]癸-8-基自由基 (Spiro[4.5]decan-8-yl)

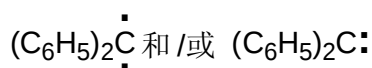
注：例外的是，HO•和 HOO•的名称分别是“羟基自由基” (hydroxyl) 和“氢过氧基自由基” (hydroperoxyl)。

6.7.1.2. 二价和三价自由基

形式上通过从单核母体氢化物 CH_4 、 NH_3 、和 SiH_4 移除两个氢原子而形成的二价自由基中心可分别命名为“甲亚基自由基” (“methylenidene, methylene”) 或“卡宾” (“carbene”); “氮亚基自由基” (“azanylidene”)、 “氮宾” (“nitrene”)或“氨亚基自由基” (“aminylene”); 和“甲硅亚基自由基” (“silylene”)。这些母体氢化物自由基的衍生物可按照取代命名法命名。

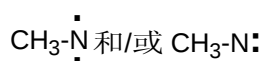
注：这些名称的使用并不蕴含特定的电子构型。如果需要，可通过添加诸如“单线态”、“三线态”等词语或描述性短语来加以区分。

例：



二苯基甲亚基自由基 (Diphenylmethylen) (首选)

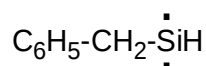
二苯基卡宾 (Diphenylcarbene)



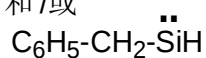
甲基氮亚基自由基 (Methylazanylidene)

甲基氮宾 (Methylnitrene)

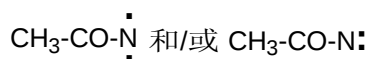
甲基氨亚基自由基 (Methylaminylene)



和/或



苄基甲硅亚基自由基 (Benzylsilylene)



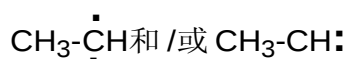
乙酰基氮亚基自由基 (Acetylazanylidene)

乙酰基氮宾 (Acetylnitrene)

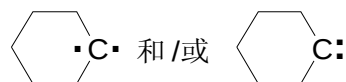
乙酰基氨基亚基自由基 (Acetylaminylene)

形式上从母体氢化物的相同骨架原子上移除两个或三个氢原子而形成的其他二价或三价自由基中心可按照前述关于后缀“基自由基”(“yl”)的程序(见 6.7.1.1)添加后缀“亚基自由基”(“ylidene”)或“次基自由基”(“ylidyne”)。

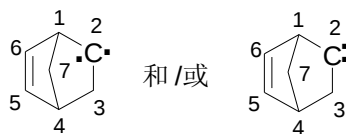
例:



乙亚基自由基 (Ethylidene)



环己亚基自由基 (Cyclohexylidene)



双环[2.2.1]庚-5-烯-2-亚基自由基 (Bicyclo[2.2.1]hept-5-en-2ylidene)

形式上从母体氢化物的两个或多个骨架原子上各移除一个或多个氢原子而形成的含有两个或多个自由基中心的多自由基,可按如下方法来命名:将表示单价自由基中心的后缀“基自由基”(“yl”)、二价自由基中心的后缀“亚基自由基”(“ylidene”)以及三价自由基中心的后缀“次基自由基”(“ylidyne”)组合添加在母体氢化物的名称上,同时用适当的数字前缀来表示每种自由基中心的个数。(在英文中如果母体氢化物名称的最后一个字母是“e”,则先把字母“e”去掉,然后写字母“y”。)

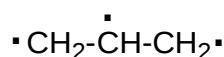
例:



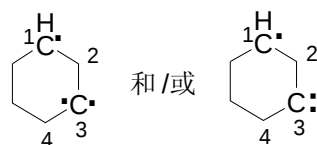
2 1

二氮烷-1,2-二基自由基 (Diazane-1,2-diyl)

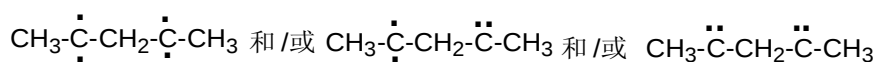
肼-1,2-二基自由基 (Hydrazine-1,2-diyl)



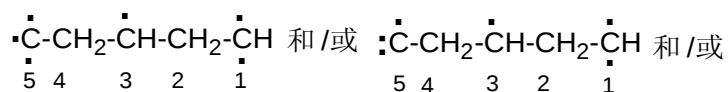
丙烷-1,2,3-三基自由基 (Propane-1,2,3-triyl)



环己烷-1-基自由基-3-亚基自由基 (Cyclohexan-yl-3-ylidene)



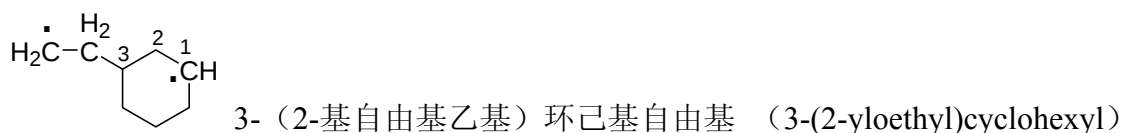
戊烷-2,4-二亚基自由基 (Penta-2,4-diylidene)



戊烷-3-基自由基-1-亚基自由基-5-次基自由基 (Pentan-3-yl-1-yliden-5-ylidyne)

要将存在于取代基中的自由基中心作为前缀的时候, 再在取代基名前加前缀“基自由基-” (英文中加“ylo-”表示), 依次表明移除一个氢原子。

例:

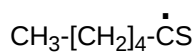


6.7.1.3. 特性基团上的自由基中心

酰基自由基, 即至少一个氧族或氮原子通过(形式)双键连接到自由基中心, 可以看做是形式上通过从酸特性基团失去羟基而形成的, 可通过用“基自由基”(“yl”)(有时“oyl”)替换名称的结尾“-酸”(“-ic acid”)或“-羧酸”(“-carboxylic acid”)来命名。或者, 可以在适当的母体氢化物的基础上, 用诸如“氧亚基”(oxo-)、“硫亚基”(thioxo-)、

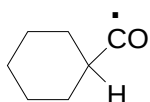
“氨亚基”（imino-）等前缀来为酰基自由基命名。

例：



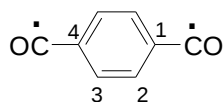
己烷硫代酰基自由基（Hexanethieryl）

1-硫亚基己基自由基（1-Thioxohexyl）



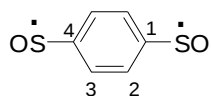
环己烷羰基自由基（Cyclohexanecarbonyl）

环己基氧亚基甲基自由基（Cyclohexyloxomethyl）



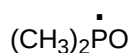
对苯二甲酰基自由基（Terephthaloyl）

1,4-苯叉基二（氧亚基甲基自由基）（1,4-Phenylenebis(oxomethyl)）



苯-1,4-二亚磺酰基自由基（Benzene-1,4-disulfinyl）

1,4-苯叉基二（氧亚基-λ⁴-硫烷基自由基）（1,4-Phenylenebis(oxo-λ⁴-sulfanyl)）

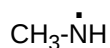


二甲基次膦酰基自由基（Dimethylphosphinoyl）

二甲基氧亚基-λ⁵-膦烷基自由基（Dimethyloxo-λ⁵-phosphanyl）

形式上通过从胺、亚胺或酰胺特性基团上移除一个或两个氢原子而形成的自由基，对于单价自由基而言，可通过将后缀“-氨基自由基（-aminyl）”、“-氨亚基自由基（-iminyl）”，或“-酰胺基自由基（-amidyl）”加在母体氢化物名称的后面来命名，而对于二价自由基而言，则作为取代的氮宾来命名。或者，可以在母体氢化物“氮烷（-azane）”的基础上相应命名。

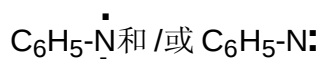
例：



甲基氨基自由基（Methanaminyl）

甲基氮烷自由基（Methylazanyl）

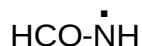
(习惯上称为: 甲基氨基自由基 (Methylamino))



苯基氮烷亚基自由基 (Phenylazanylidene)

苯基氮宾 (Phenylnitrene)

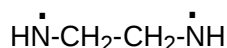
苯基氨基亚基自由基 (Phenylaminylene)



甲酰胺基自由基 (Formamidyl)

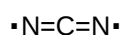
甲酰基氮烷基自由基 (Formylazanyl)

具有由在两个或多个胺、亚胺或酰胺特性基团上等同产生的自由基中心的多自由基, 其命名可适用等同单位的组装的命名法, 使用多重前缀“二-”、“三-”等来完成。
例:



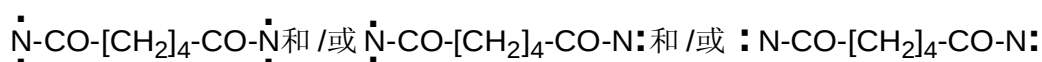
乙叉基二氨基自由基 (Ethylenebis(aminyl))

乙叉基二氮烷基自由基 (Ethylenebis(azanyl))



甲烷二亚基二氨基自由基 (Methanediylidenebis(aminyl))

甲烷二亚基二氮烷基自由基 (Methanediylidenebis(azanyl))



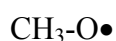
己烷二酰基二(氮烷亚基自由基) (Hexanedioylbis(azanylidene))

己烷二酰基二(氮宾) (Hexanedioylbis(nitrene))

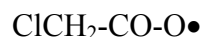
己烷二酰基二(氨基亚基自由基) (Hexanedioylbis(aminylene))

形式上通过从酸的羟基或羟基特性基团上移除氢原子而形成的自由基是以复合的母体自由基名称为基础来命名的, 该复合的母体自由基名称是通过将从母体氢化物或与氧族原子连接的酸残基派生的适当的前缀与词尾“氧基自由基”(“oxyl”)、“过氧基自由基”(“peroxyl”)合并而成的。

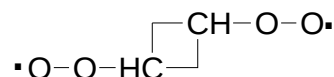
例:



甲氧基自由基 (Methoxyl)



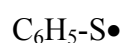
氯乙酰氧基自由基 (Chloroacetoxyl)



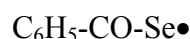
环丁烷-1,3-二基二过氧基自由基 (Cyclobutane-1,3-diylldiperoxyl)

氧族类似物以母体自由基为基础来命名，如“硫烷基自由基 (sulfanyl)”、“硒烷基自由基 (selanyl)”。

例：



苯基硫烷基自由基 (Phenylsulfanyl)



苯甲酰基硒烷基自由基 (Benzoylselanyl)

6.7.2. 正离子

形式上通过在具有标准成键数（见 2.1 节）的氮、氧族元素、和卤素家族（15，16，17 族）的单核氢化物（见 3.1 节）添加一个氢正离子（hydron）而形成的母体正离子的命名是通过在该元素单核氢化物的词根上添加后缀“正离子”（“-onium”），由于元素单核氢化物的名称中‘甲’和‘烷’字通常省略，因此即可为该元素名称加“正离子”来命名（见表 6-7-1）。中文过去一些书刊中对这类正离子曾采用“-onium”音译的“鎘”字加离子作为后缀进行命名，但现修订建议除‘氧鎘(离子)’还可保留同时使用外，其它正离子均不使用“鎘”字命名。IUPAC-2013 的征求意见稿中也建议采用单核氢化物名称后加“-ium”后缀作为命名优先用词，而不是以“-onium”为后缀。正离子上的取代基仍按照通常的方式表述。

表 6-7-1. 单核母体正离子

母体正离子	中文名称	英文名称	母体正离子	中文名称	英文名称
NH_4^+	(甲)氮(烷) 正离子 铵(离子) ^a	ammonium	SeH_3^+	(甲)硒(烷) 正离子	selenonium (selanium) ^d
PH_4^+	(甲)磷(烷) 正离子 ^b	phosphonium (phosphanium) ^d	TeH_3^+	(甲)碲(烷) 正离子	telluronium (tellanium) ^d
AsH_4^+	(甲)砷(烷)	arsonium	FH_2^+	(甲)氟(烷)	fluoronium

	正离子 ^c	(arsanium) ^d		正离子	(fluoranium) ^d
SbH_4^+	(甲)锑(烷)正离子	stibonium (stibonium) ^d	ClH_2^+	(甲)氯(烷)正离子	chloronium (chloranium) ^d
BiH_4^+	(甲)铋(烷)正离子	bismuthonium (bismuthanium) ^d	BrH_2^+	(甲)溴(烷)正离子	bromonium (bromanium) ^d
OH_3^+	(甲)氧(烷)正离子, 氧鎢(离子)	oxonium (oxidanium) ^d	IH_2^+	(甲)碘(烷)正离子	iodonium (iodanium) ^d
SH_3^+	(甲)硫(烷)正离子	sulfonium (sulfanium) ^d			

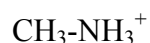
^a 中文中完整名称为甲氮烷正离子, 但习惯上, 包括无机化学界, 均已接受简称铵(离子)。英文中名称“nitronium” (“硝基正离子”) 用于 NO_2^+ 正离子, 即便如此, 该正离子还可以命名为 “nitrylium” (“硝酰基正离子”), 为此名称“nitronium”不可用来表示 NH_4^+ , 以免由于过去的使用而含混不清。

^b 曾有仿效“铵(离子)”而使用“鎿(离子)”, 但本建议倾向于尽量少用定义不清的生僻字(词)。

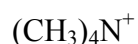
^c 曾有仿效“铵(离子)”而使用“鉍(离子)”, 但本建议倾向于尽量少用定义不清的生僻字(词)。

^d IUPAC-2013 建议优先用词。

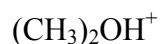
例:



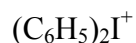
甲铵(离子) (Methylammonium)



四甲基铵(离子) (Tetramethylammonium)



二甲基氧正离子 (鎢(离子)) (Dimethyloxonium)



二苯基碘正离子 (Diphenyliodonium)

形式上通过在中性母体氢化物的任何位置上添加一个或多个氢正离子而形成的正离子, 可通过在母体氢化物名称的后面添加后缀“-正离子” (“-ium”)、“-双正离子” (“-dium”) 等来命名。

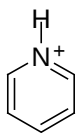
例:



甲烷正离子 (Methanium)



乙烷正离子 (Ethanum)

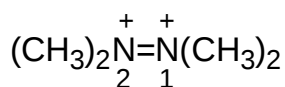


吡啶-1-正离子 (Pyridin-1-ium)



或 $[\text{C}_6\text{H}_7]^+$

苯正离子 (Benzenium)



四甲基二氮烯-1,2-双正离子 (Tetramethyldiazene-1,2-diium)

形式上从母体氢化物移除一个氢负离子 H^- 而形成的正离子用后缀“-基正离子”(“ylium”)来命名, 这和用后缀“基”(“yl”) (见 6.7.1.1 节) 的方式相同。形式上从母体氢化物移除两个或多个氢负离子而形成的二-或多正离子通过在母体氢化物的名称后面加后缀“-叉(亚)基双正离子”(“bis(ylium)”、“-爪(次)基叁正离子”(“tris(ylium)”)等等来命名。正离子形式上可看作是从相应的基团失去未配对电子而形成的, 因此也可在该基团的名称后加类别名称“正离子”(cation)来命名。由此在英文中就可能有二种名称, 但中文中二种命名方式均得同一名称。

例:



甲基正离子 (Methylium) (Methyl cation)



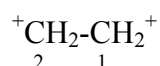
甲锗基正离子 (Germylium) (Germyl Cation)



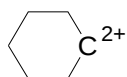
丙基正离子 (Propylium) (Propyl cation)



环丙基正离子 (Cyclobutylum) (Cyclobutyl cation)



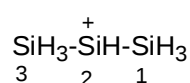
乙叉基双正离子 (Ethane-1,2-bis(ylum)) (Ethylene dication)



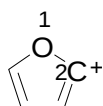
环己亚基双正离子 (Cyclohexane-1,1-bis(ylum)) (Cyclohexylidene dication)



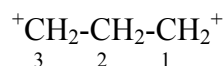
巯基正离子 (Sulfanylium) (Sulfanyl cation)



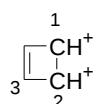
丙硅烷-2-基正离子 (Trisilan-2-ylum) (Trisilan-2yl cation)



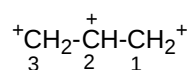
呋喃-2-基正离子 (Furan-2-ylum) (Furan-2-yl cation)



丙烷-1,3-二基双正离子 (Propane-1,3-bis(ylum)) (Propane-1,3-diyl dication)



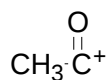
环丁-3-烯-1,2-叉基双正离子 (Cyclobut-3-ene-1,2-bis(ylum)) (Cyclobut-3-ene-1,2-diyl dication)



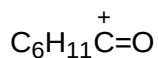
丙烷-1,2,3-爪基叁正离子 (Propane-1,2,3-tris(ylum)) (Propane-1,2,3-triyl trication)

形式上从用后缀表述的酸特性基团上以羟离子的形式失去整个羟基而形成的正离子，其命名方法是通过用后缀“-酰基正离子”替代“-酸”。英文中则是以“ylum”替代末尾的“-ic acid”，或者用“-carbonylium”替代“-carboxylic acid”来进行命名；也可以通过在酰基的名称后面添加类型名称“cation”来命名，这一方式与中文一致。

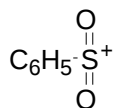
例：



乙酰基正离子 (Acetylium) (Acetyl cation)



环己烷甲酰基正离子 (Cyclohexanecarbonylium) (Cyclohexanecarbonyl cation)



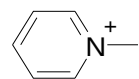
苯磺酰基正离子 (Benzenesulfonylium) (Benzenesulfonyl cation)

自由价在正离子位置上的单价单正离子的母体正离子作为取代基,其作为前缀时的名称是通过将母体正离子名称末尾后再加‘基’字,英文则将末尾“-ium”或”onium”)改为“-io”或”-onio”而成。

例:



铵基 (Ammonio)

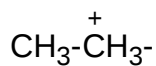


吡啶-1-正离子-1-基 (Pyridin-1-ium-1-yl)

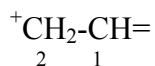
吡啶正离子基 (Pyridinio)

用来表述含有正离子中心的取代基结构单元的前缀名称的系统形成方法是:将后缀“-基” (“-yl”)、“-亚基” (“-ylidene”)、“-叉基” (“-diyl”)等等添加到母体正离子上,同时用合适的位次表明位置。

例:



乙烷-1-正离子-1-基 (Ethan-1-ium-1-yl)



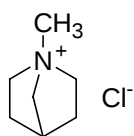
乙(烷)基-2-正离子-1-亚基 (Ethan-2-ylum-ylidene)



λ^4 -硫正离子叉基 (λ^4 -Sulfanyliumdiyl)

就置换命名法而言，连缀字‘杂’置于该杂原子正离子之后，如‘氮正离子杂’、‘硫正离子杂’。

例：



氯化 1-甲基-1-氮正离子杂双环[2.2.1]庚烷 (1-Methyl-1-azoniabicyclo[2.2.1]heptane chloride)

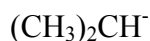
6.7.3. 负离子

形式上通过从中性母体氢化物的任何位置移除一个或多个氢正离子而形成的负离子可在母体氢化物基名称的后面加‘负离子’或‘双负离子’、‘叁负离子’等进行命名。英文中则用后缀“-ide”替换母体化合物名称末尾的“e”(如果有字母 e 的话)，或者在母体氢化物名称的后面添加后缀“-diide”、“-triide”等来命名；英文中有另一种命名法，可认为负离子是形式上通过向自由基添加一个电子而形成，因此也可在该自由基名称的后面添加类型名称“负离子”来命名。

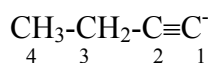
例：



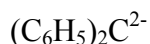
甲基负离子 (Methanide) (Methyl anion)



丙(烷)-2-基负离子 (propan-2-ide) (Propan-2-yl anion, 1-Methylethyl anion)



丁-1-炔-1-基负离子 (but-1-yn-1-ide) (But-1-yn-1-yl anion)

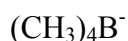


二苯基甲亚基双负离子 (diphenylmethanediide) (Diphenylmethylene dianion)

注：作为例外，仍保留表示负离子 H_2N^- 和 HN^{2-} 的“胺负离子”(“amide”)和“亚胺负离子”(“imide”)。

形式上通过向母体氢化物添加一个氢负离子而形成的负离子可采用该母体氢化物名称后加‘负离子’来命名。英文中则通过用后缀“-uide”替换母体氢化物名称末尾的“e”(如果存在字母 e 的话)来命名*。

例:

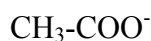


四甲基硼(烷)负离子 (Tetramethylboranuide)

*在过去英文命名法中, 这样的负离子只按照配位化学命名法的原则来命名, 例如, BH_4^- 称为四氢化硼 (-1) 负离子, 或者用以'-ata'为结尾的前缀通过置换命名法来命名, 如以'borata'来命名 $-\text{B}^-\text{H}_2-$ 。

通过从酸特性基团或官能性母体化合物的氧族原子以氢正离子的形式失去该氢原子而形成的负离子可简单地在酸后加根离子来命名。英文中则通过分别用"-ate"或"-ite"替换酸名称的末尾"-ic acid"或"-ous acid"来命名。

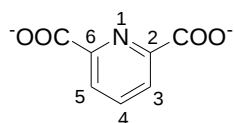
例:



乙酸根离子 (Acetate)



苯磺酸根离子 (Benzenesulfonate)



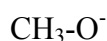
吡啶-2,6-二羧酸根离子 (Pyridine-2,6-dicarboxylate)



二苄基次亚膦酸根离子 (Dibenzylphosphinite)

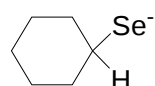
通过从羟基特性基团或以后缀“-醇”、“-硫醇” (“-ol”, “-thiol”)来表述的氧族类似物上以氢正离子的形式失去该氢原子而形成的负离子可通过向适当的后缀添加后缀“-根离子” (“-ate”)来命名。当相应的 RO-基团具有简约名称例如甲氧基 (methoxy) 时, 该负离子的名称可通过将“甲氧基”改成“甲氧负离子” (“methoxide”)来形成。

例:

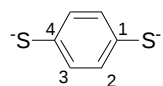


甲醇根离子 (Methanolate)

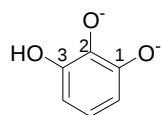
甲氧负离子 (Methoxide)



环己烷硒醇根离子 (Cyclohexaneselenolate)



苯-1,4-双硫酚根离子* (Benzene-1,4-bis(thiolate))



3-羟基苯-1,2-双酚根离子 (3-Hydroxybenzene-1,2-bis(olate))

* 这里使用倍数词前缀“双”(“bis”)是因为后缀“二醇根”(“diolate”)或“二酚根”(“dithiolate”)有可能被理解为是表述单负离子 $\text{HO-C}_6\text{H}_4\text{-O}^-$ 或 $\text{HS-C}_6\text{H}_4\text{-S}^-$ 。

用来表述从酸特性基团产生的负离子中心的前缀的命名是通过将该酸或该母体单核名称的后缀末尾“-酸”(“-ic acid”)更改为“-酸根离子基”(“-ato”)。

例:

-COO^-

羧酸根离子基(carboxylato)

-SO_3^-

磺酸根离子基(sulfonato)

$\text{-PO(O}^-\text{)}_2$

磷酸根离子基(phosphonato)

用来表达负离子氧族原子或原子链的前缀可通过将该负离子名称后加“-基”命名。英文中则可将该负离子名称的末尾“e”替换为“o”来命名。

例:

-O^-

氧根离子基(oxido)

用来表达含负离子中心的取代基结构单元的前缀可系统地通过母体负离子名称后加“-基”或“-亚基”的方式来命名。英文中则可用操作后缀“-yl”或“-ylidene”替换母体负离子名称的末尾字母“e”，或者通过将操作后缀诸如“-diyl”添加到母体负离子名称来产生。

例:



甲基负离子基 (methanidyl)



二硫(烷)根离子基 (Disulfanidyl) (英文过去称为 disulfido)



氮负离子亚基 (amidylidene)

就置换命名法而言, 负离子置换前缀可以该单核母体氢化物名称后加“-负离子杂”来命名。英文中则可通过用操作后缀“-ida” (对相应于“-ide”的负离子而言) 和“-uida”* (相应于“-uide”的负离子而言) 替换单核母体氢化物 (见 3.1 节) 名称的末尾 e 而产生。

例:



(甲)磷(烷)负离子杂 (phosphanida)



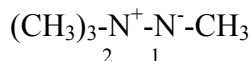
(甲)硼(烷)负离子杂 (boranuida)

*在 IUPAC-1979 命名中, 以“-ata”结尾的负离子替代前缀 (如用于 $-\text{BH}_2^-$ 的“-borata”) 也用于表达“uide”负离子, 那时没有用来表达“ide”负离子的替代前缀。

6.7.4. 同一个结构中的正离子和负离子中心

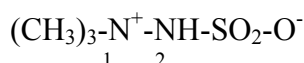
两性离子化合物的命名是在母体氢化物的名称后依次加上标明位次的正离子和负离子后缀。英文则以“-ium”、“ylium”、“-ide”和“-uide”的顺序组合在母体氢化物 (中性的或离子性的) 名称的末尾。

例:



1,2,2,2-四甲基二氮烷-2-正离子-1-负离子 (1,2,2,2-Tetramethyldiazan-2-ium-1-ide)

1,2,2,2-四甲基肼-2-正离子-1-负离子 (1,2,2,2-Tetramethylhydrazin-2-ium-1-ide)

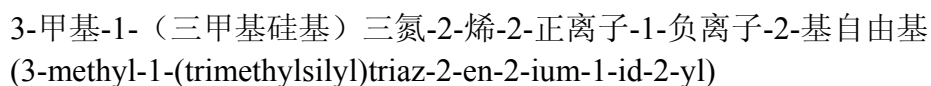
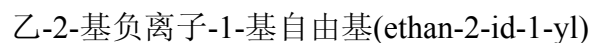
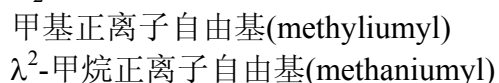


1,1,1-三甲基二氮烷-1-正离子-2-磺酸根离子 (1,1,1-Trimethyldiazan-1-ium-2-sulfonate)

1,1,1-三甲基肼-1-正离子-2-磺酸根离子 (1,1,1-Trimethylhydrazin-1-ium-2-sulfonate)

6.7.5. 自由基离子

例：



第 7 章 立体化学

7.1. 引言

立体化学是研究分子其静态和动态的三维空间化学。近几十年来立体化学研究有了很大的进展，它的进展也促使了其它与其交叉学科的迅速发展。立体化学的命名和术语也在学科的发展中有所变化和创造。立体化学进化过程中，IUPAC 也对历次推荐的立体化学术语作出了相应的调整，最近的为 1996 年 IUPAC 推荐的“立体化学基本术语”^[7-1]。

有机化合物命名时，对化合物立体异构体的描述是通过立体化学的术语、符号，以“立体词头”(stereodescriptor)的形式，作为一种前缀置于化合物名称的最前面，这些“立体词头”中常见的如 D, L; R, S; R*, S*; *pro-R*, *pro-S*; *r*, *s*; *E*, *Z*; *cis*, *trans*; α , β ……等。而某些化合物俗名，如富马酸(fumaric acid)，胆固醇(cholesterol)，葡萄糖(glucose)等名称则已包含立体结构信息，无需另加“立体词头”。下面将分类介绍各类立体异构体的命名和相应“立体词头”在化合物命名中的使用，但在这之前有必要对若干主要的立体化学术语作一说明，以理解其发展更新的词汇意义。

7.1.1. 分子“手性”

“手性”(chirality)是一种几何属性。任何一个实体与它的镜像不能重合，而只是如同正常人的左右手那样互为镜像，这类实体是“手性的”(chiral)。如果实体与它的镜像等同重合，则是“无手性的”(achiral)。

‘手性的’这一术语早已引进学术界，然而一直到上世纪六十年代中期，‘手性’(chirality)概念才被稳固地引入有机立体化学，对一个确定构型和构象的分子模型而言，“手性”是分子存在一对对映异构体的必要和充分条件，它是现代立体化学中的一个核心概念。

任何一个分子是否是“手性”还可以从其分子自身模型所具备的对称因素来分析。凡是具有对称面，对称中心或者旋转反映轴对称因素的分子是无手性分子。有对称中心或对称面的分子较易辨别，有旋转反映轴的分子是经过旋转和反映的对称动作后，回复到原来的分子模型。

手性分子除了不对称分子外，还包括存在含有对称轴因素的分子。含有 C_2 对称轴的手性分子相当普遍，如反式 1, 2-二氯代环丙烷，右旋或左旋的酒石酸及其衍生物等。

在立体化学中“手性”和“不对称”不是等同的术语。因此称分子“不对称”(asymmetry)是存在对映体的条件是不确切的，过去曾用“非对称”(dissymmetry)来替代“不对称”，但从字义上很难理解其含义。自从“手性”这个术语引入立体化学后，则就确切地表达了分子结构存在对映异构体的条件。

立体化学中手性是描述分子结构模型的几何特征，因此，“手性的”应使用于化学物质，如“手性催化剂”，“手性药物”，“手性固定相”，而不适用于描述过程，如“手性色谱”，“手性催化”，“手性合成”等。目前文献上使用“手性的”描述过程往往过多，不很恰当。

7.1.2. 关于“旋光性”

长期以来，有机化学工作者对于化合物的“旋光性”(optical activity)很重视。以前 optical activity 常被称为“光学活性”，现在译成“旋光性”应是更为确切。早期测量旋光为判断分子的非对称性作出了重要贡献。旋光性是一种被测物质的宏观物理现象，一个外消旋化合物由一对对映体组成，其比旋度为零。一些手性分子如不同烷基组成的烷烃类化合物，甚至在一段波长范围内都不能测到其比旋度。这种分子称为“隐手性的”(cryptochiral)。由于比旋度随着温度，溶剂或 PH 值发生变化，有可能从正值通过零点变成负值，也就是手性分子在某一测量条件下的比旋度可为零。

随着手光性(chiroptical properties)中的旋光色散(ORD)，圆二色散(CD)，以及各种类型色谱，核磁共振等各类光谱技术，X 射线晶体结构衍射分析的引入，使化学家对分子结构的鉴定达到一个崭新的水平。单一波长测定化合物旋光性的重要性就逐步降低，旋光测定是一个简便而重要的诊断工具，但在现代立体化学中已不是必要的方法。

在一段时间内，曾将“手性分子”和“旋光性化合物”等同看待，在 1974 年 IUPAC 命名委员会推荐的立体化学命名中称‘所有手性分子都是旋光性化合物分子’，‘手性和旋光性是 1:1 相当’。从目前的观点分析，显然是过于绝对化，因而在 1996 年推荐的“立体化学基本术语”中，“手性”除了定义它的非重叠镜像的几何特征外，就是不存在第二类对称因素(即对称面，对称中心和旋转反映轴)。而未直接述及“手性”与“旋

光性”之间的关系。

显然,分子“手性”未必一定与“旋光性”联系起来,“旋光的”(optical)术语在有机立体化学中已经减少使用。根据 IUPAC 的推荐:“旋光的”术语 仅限于用比旋度测定的“旋光纯度”(optical purity)和“旋光产率”(optical yield)中应用。

“旋光异构体或光学异构体”,“旋光拆分或光学拆分”这类过去常用词汇也逐步被淘汰使用。“旋光异构体拆分”改为“外消旋体拆分”,“旋光异构体”改为“对映异构体”来表达。而早期使用的“旋光对映体或光学对映体”(optical antipode)现在已被完全放弃使用。

7.1.3. 关于前手性和前立体异构现象

在有机化合物指明构型时使用 CIP 系统(参见 7.3.2 节)后,生物化学家首先扩展“手性”概念,应用“前手性”(prochirality)概念描述分子中“同形的”(homomorphic)取代(包括基团或原子),在酶选择性反应中,在不对称合成的“去对称”(desymmetrisation)步骤中区别相同形的取代基,指出它们潜在手性的环境。

“前手性”能用 *pro-R* / *pro-S* 系统来区别前手性中心上两个同形的取代基。进而顺序规则应用于二维平面,辨别两个“异位面”(heterotopicface)的方向,用 *pro-Re* / *pro-Si* 系统来描述。

除了取代和加成的准则,分子中不同的立体异位性也能用分子内对称因素来判别,“前手性”的概念也能应用于无手性分子产生立体异构体,因此扩展为“前立体异构现象”(prostereoisomerism),对此可详阅专著^[7-2]。

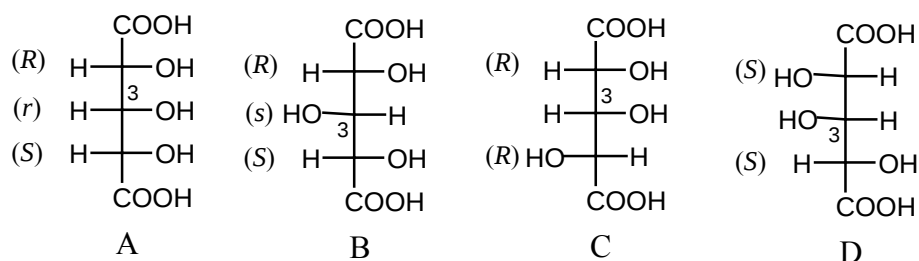
7.1.4. 立体异构源因素 (stereogenic unit, stereogen, stereoelements)

在立体化学发展历史中,首先认识对映异构体是由于分子中存在不对称碳原子,即它有四个不同的取代基,交换任何两个取代基形成其对映异构体。事实上它是说明碳原子周围的环境,而不是碳原子本身。随着手性术语的引入,不对称碳原子逐步由“手性中心”替代,手性中心不但可以是碳原子,还可以其它元素如磷、氮、硅、硫等都有可能成为中心。当然没有任何元素也可能存在一个抽象的中心,如四个桥头不同取代的金刚烷是手性分子,但它的中心没有任何元素占有。

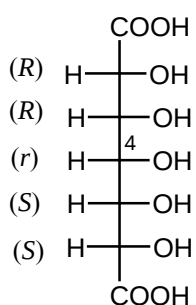
一个手性中心的化合物存在一对对映异构体,没有例外。而二个或者二个以上手性

中心的化合物则就情况复杂，酒石酸是有两个手性中心的化合物，但是仅存在三个立体异构体。内消旋酒石酸是无手性分子，右旋和左旋酒石酸是一对对映异构体，它们与内消旋酒石酸是非对映异构体关系。而三个酒石酸相互之间是立体异构体关系。说明立体异构中的“手性”分子和分子中的“手性中心”存在没有必然联系，

内消旋 2,3,4-三羟基戊二酸 **A** 和 **B** 是两个非对映异构体，因为通过 C-3 有一个对称面，它们是无手性分子，而按照定义带有四个不同取代基的 C-3 是不对称碳原子，事实上交换 C-3 上两个不同取代基，形成另一个非对映异构体。因此，**A** 和 **B** 的 C-3 曾被称为“假不对称碳原子”，尽管目前它还出现在若干教科书中，但专家们认为这是一个很不恰当的术语。而 2,3,4-三羟基戊二酸另二个立体异构体 **C** 和 **D** 则是一对对映异构体的手性分子，而 C-3 上却不是手性中心，因为交换 C-3 上任何二个配基，形成相同分子。



下一奇数高系列化合物 2,3,4,5,6-五羟基庚二酸有六对对映体，以及四个内消旋异构体，对映异构体中有二对的 C-4 不是手性中心，而所有内消旋异构体的 C-4 是所谓的“假不对称碳原子”。“假不对称碳原子”可按照 CIP 规则，用小写字体 *r* 或 *s* 表示它们构型，如 2,3,4,5,6-五羟基庚二酸的一个内消旋异构体。



事实说明不对称碳原子和分子手性没有必然关系，因此 Mislow 等提出“不对称碳原子”和“手性因素”是往往使若干立体化学概念发生混淆的原因^[7-3]。

于是“立体异构源中心” (stereogenic center) 术语又被引入立体化学，按照原义它是分子实体中立体异构现象的集中点，在此中心交换两个取代基形成一个新的立体异构体（同样可以扩展到轴和面）。进而从立体化学的角度，还引进“手性位的” (chirotopic) 或“无手性位的” (achirotopic) 的术语来描述分子中任何片段或点所处的环境。任何

手性分子所有的点（包括原子）都是手性位的，甚至带有一个或二个相同取代基（如手性分子中的甲基上氢），而无手性分子中存在诸多手性位的点，如内消旋-酒石酸除了 C-2 和 C-3 键的中点是无手性位外，所有的点和原子是处在手性位的。任何一个原子在分子中的立体化学描述采用两者的结合较为确切。虽然立体异构源性和手性位性是相互独立的属性，前者是密切结合键连接的排列，后者独立于成键的方式。

因此，称为具有“假不对称碳原子”的分子 A 和 B 的 C-3 是立体异构源中心和无手性位的碳原子，而一对对映体 C 和 D 的 C-3 用非立体异构源中心和手性位的碳原子来描述才恰当。

进而，“立体异构源中心”应用于无手性的化合物，如 1,2-二取代烯类化合物，存在顺式或反式非对映异构体，如顺式或反式 1,3-二氯环丁烷，它们是无手性分子，没有任何的手性中心，交换它们的任何的 1 或 3 位氢和氯原子，产生其非对映异构体。无手性分子 1,3-二氯环丁烷的 1 或 3 位，用以“立体异构源中心”表达是很确当的。也进一步说明立体异构现象和分子手性没有必然关系。

目前“立体异构源中心”替代“不对称碳原子”和“手性中心”在普通化学文献中较常见，而“手性位的”主要用于理论研讨。

“不对称碳原子”到“手性中心”的演变，至今成“(非)立体异构源中心”和“(无)手性位的”结合表达的趋势，是立体化学基本术语进化的标志。

7.2. 立体化学中三维结构的构型图像表达方式

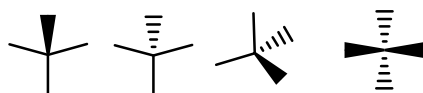
1996 年 IUPAC 推荐出版的“立体化学术语”中的开始一节简要介绍了有机化合物‘三维结构的图像表达’^[7-1]，2006 年 IUPAC 公布的“立体化学构型的图像表达”中又进一步扩充和改进了图像表达方式^[7-4]。

7.2.1. 立体化学构型的结构图表达

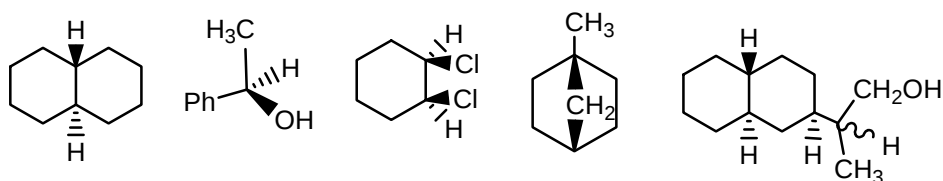
结构图表达立体化学构型必需十分明确而不含糊，虽然三维结构在二维纸平面上表达会有不同程度的变形。利用透视图案表达化合物的原子之间，如在有机化合物最常用的碳-碳键相互之间，按 IUPAC 的推荐：画直线(——)表示键近似在纸平面上，黑体楔形线表达窄端开始于纸平面上的原子，键伸向纸平面上方，黑体粗线(——)也能表达键在纸平面上方，但是后者一般不推荐使用。虚黑体楔形线(.....)(窄端

开始于纸平面上的原子，虽然相反也能够使用）或短的平行虚线（)表达键伸向纸平面下方（但是一个结构式中不得同时使用二者）。（注意：破裂的直线（)表达部分键，离域键或氢键）。构型未知的键用波纹线（)表达。

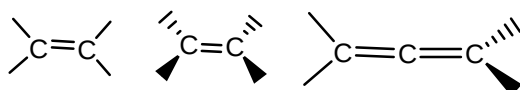
一般地说，四面体碳构型表达推荐如下：



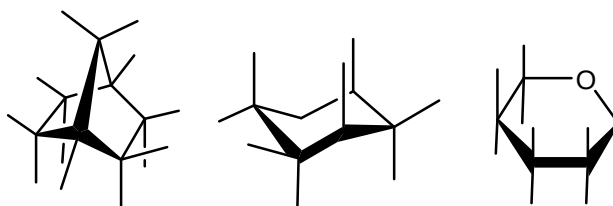
因此，一些有机化合物的立体结构可表达如下：



双键化合物的构型表达，键角要尽可能精确(约 120°)：



一些环状，包括桥环化合物可通过透视图表达如下：

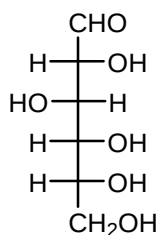


7.2.2. 立体化学构型的透视图和投影图表达

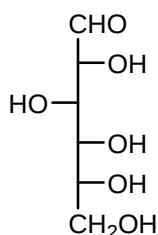
虽然 IUPAC 叙述立体化学构型的图像表达方式可以分为透视图案以及投影图案，但实际分类命名时，还有含糊不清。现将几种主要图像表达方式分述如下：

7.2.2.1. Fischer 投影法 (Fischer projection)

Fischer 投影法原始提出是为碳水化合物及其衍生物投影在纸平面上表达其构型的方法，碳水化合物的主链垂直拉长指向纸平面后方，取代基置于水平纸面上前方。如 D-葡萄糖：



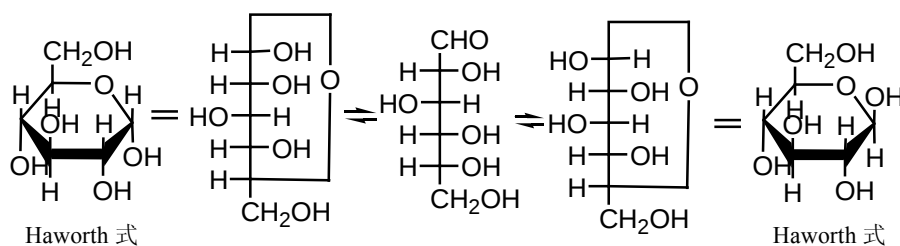
或者氢不描绘，从而简化为：



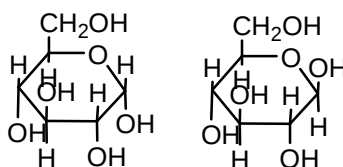
Fischer 投影法对于碳水化合物的构型表达非常完美，但对于其它化合物，如多分支碳链或者环状化合物的构型表达就存在问题。

7.2.2.2. Haworth 式 (Haworth projection)

Haworth 式用于环状碳水化合物，一般碳水化合物在溶液中存在直链和环状的平衡，如 D-葡萄糖倾向于以环状半缩醛的吡喃糖形式呈现，它的氧原子在六员环后方，异头 (anomeric) 碳置于环右端，即为 Haworth 投影式，下图左侧 Haworth 投影式的羟基在六元环异头碳下方是为 α 异构体，右侧式的羟基在环上方则为 β 异构体。

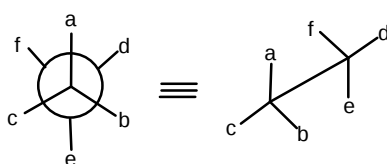


Haworth 式中所有碳-碳键也能简化为用直线表示：



7.2.2.3. Newman 投影法 (Newman projection)

Newman 投影法是表达一个分子中邻近二个碳原子之间的空间排列，沿二个重叠碳原子的轴观察，看前面原子的取代基从圆心开始，后方原子的取代基在圆外周表达。Newman 投影法的特点是不但表达原子的取代基的构型，也描述了二个原子取代基间的构像关系。但它仅限于表达邻近二个原子之间的空间排列关系。

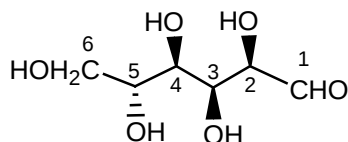


7.2.2.4. 锯木架形式 (sawhorse projection)

锯木架形式也是表达一个分子中邻近二个碳原子之间的空间排列，二个碳原子之间用一斜线连接，左手较低端碳原子接近观察者，右手较高端碳原子远离观察者。二个碳原子上取代基能同时表示构型和构像关系。上图右面即为锯木架形式。

7.2.2.5. 锯齿形式 (zig-zag projection)

锯齿形式适用于无环长链碳化合物，它的碳链水平躺在纸平面成锯齿形状，取代基用黑体楔形或虚黑体楔形表达，用 *syn*- 或 *anti*- 符号来表达相对构型。如 D-葡萄糖用锯齿形式表达时，其羟基构型用 2,3-*syn*, 2,4-*syn*, 2,5-*anti* 来描述。锯齿形式表达相对构型是很简便，但是它仅适合于长碳链化合物，如立体选择性醇醛缩合产物。



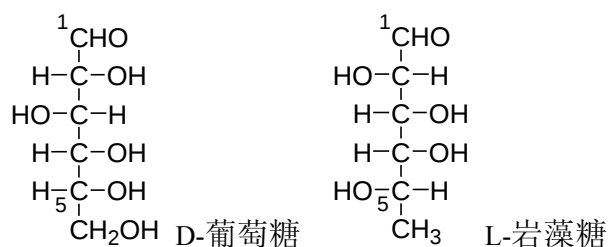
7.3. 手性化合物的构型表示法

7.3.1. 用 D, L 或其它俗名表示:

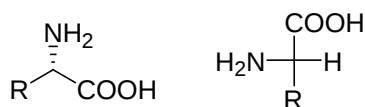
历史上，天然产物氨基酸，糖类，环多元醇及其衍生物的构型命名，用 D, L 表示。甾体化合物环上取代用 α , β 表示。至今它们仍在被使用。

在糖类化合物按 Fischer 投影法表达方式中，以氧化态较高的碳原子置于顶端，视最高位次手性碳上的 X 取代基 (-OH) 处在右侧或左侧，而分别称为 D-或 L-构型。

例：D-葡萄糖 (D-glucose) 和 L-岩藻糖 (L-fucose) :

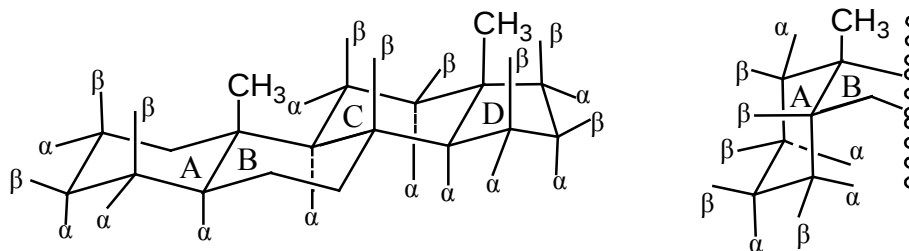


通常的天然氨基酸 α - 位氨基碳构型定为 L-型，如 L-丙氨酸 ($\text{R}=\text{CH}_3$) :



通常对甾体化合物 A-D 并环结构上用 α , β 位表达其取代基与角甲基相反或相同侧的相对构型。

如 A/B *trans* (5α) 和 A/B *cis* (5β) 甾体, 其 α , β 位取代如下图所示:



在某些学科领域中, 如氨基酸和糖类药物中用 D 和 L, 甾体化合物的 A—E 环中用 α 和 β 来表示构型还是较为满意, 但是这些体系仅限于它们某些学科领域, 不能在化学学科中普遍使用。过去使用的构型相关法, 实际上也没有形成公认的规则, 以致右旋和左旋的酒石酸, 只有在讲清构型的相对标准后, 才能正确使用构型符号 D 或 L, 而不至于引起混淆。

7.3.2. 按 CIP 优先系统 (CIP priority system) 的构型表示法

上世纪五十年代 Cahn, Ingold 和 Prelog 提出了一种判别在手性中心上各取代基优先次序的“顺序规则” (Sequence rule), 然后根据各取代基按此优先次序排列时的空间取向给予该中心 R 或 S 的构型符号标志。六十年代后进一步完善了“顺序规则”, 并扩展应用于其它立体异构体构型的标识^[7-5,7-6], 成为一通用的构型标识系统方法, 现按最早提出者姓名的第一字母而称为 CIP 优先系统 (CIP priority system)。

7.3.2.1. “顺序规则” (Sequence rule)

下列五条是“顺序规则”的基本规则, 用以对原子或基团逐条依次彻底考察、比较直至定出它们按优先次序的排列。

- (1) 原子序数大的优先于小的。
- (2) 原子质量高的优先于小的。
- (3) *cis* 优先于 *trans*, *Z* 优先于 *E*。

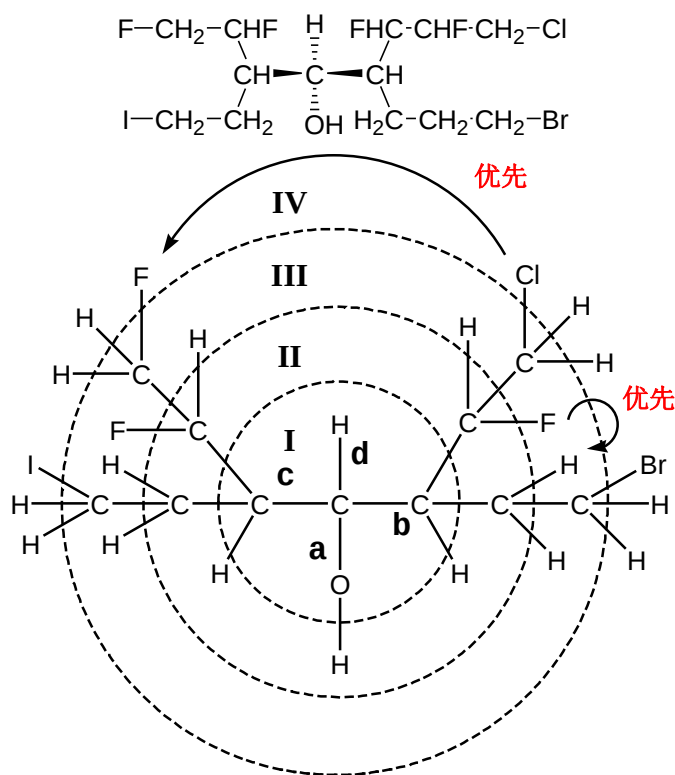
(4) *RR* 或 *SS* 优先于 *RS* 或 *SR*; *MM* 或 *PP* 优先于 *MP* 或 *PM*。

(5) *R* 优先于 *S*, *M* 优先于 *P*, *r* 优先于 *s*。

7.3.2.1.1. 导向图 (digraph) — “顺序规则” 的应用

如果考察、比较立体异构源上二个基团的第一个元素相同 (如碳原子) 时, 为了确定它们的优先次序就需要进一步考察它们链接下去的结构, 这时可将这二基团中链接的原子排列成分层级的导向图或称树状图。然后继续用顺序规则考察、比较第二层级上元素的优先级序, 如此继续直至得出结论。由第二层级进入第三层级级比较时仅考虑第二层级中占优的元素上相连的第三层级的基团, 而不考虑其它的第三层级基团。必要时用同样的方式进入第四层级或更高层级的比较。

例:



按顺序规则考察连接中心原子上的, 也即第一层次上的四个原子可以得出 $O > C$ 和 $C > H$, 但无法立即判别二个碳中何者优先, 因而就进入第二层级进行比较, 但仍无法区别, 因左右二侧均为 (C, C, H) 。下一步需进入第三层级进行比较, 左右二侧均有二个分支 (途径) 进入第三层级, 为 (F, C, H) 和 (C, H, H) , 按顺序规则 (F, C, H) 优于 (C, H, H) , 于是应由分支 (F, C, H) 进行比较, 但此时左右二侧的第三层级仍是相同, 为此再进入

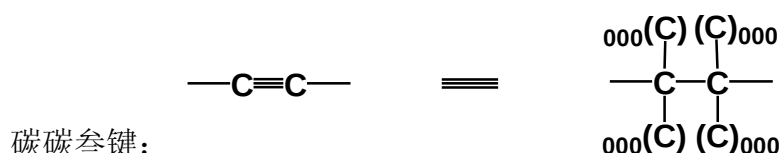
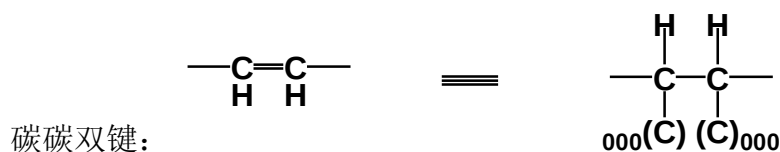
第四层级进行判别。第四层级左侧（基团 **c**）为（F, H, H），右侧（基团 **b**）为（Cl, H, H），显然右侧优于左侧，从而在此中心上四个基团按顺序规则的排列应为 **a** > **b** > **c** > **d**。需要说明的一点是从另外分支进入第四层级的有（I, H, H）和（Br, H, H），它们均优于含氟或氯的基团，但它们不是在优先的分支上，因此就不予考虑。

7.3.2.1.2. 复制原子和假想原子（duplicate atom and phantom atom）

“顺序规则”应用于单键连接的基团的排序可方便地应用上节的导向图方式，但对第一层级后含有重键、饱和环、幔环等以及含孤对电子体系的应用时尚需进行一些特殊的处理。

（1）双键和叁键的处理

双键或叁键可考虑为以单键连有一个真实的原子外还连有一个或二个复制的同样原子，复制的原子在结构式中用其元素符号加括号表示，此复制的原子也假设为四价的原子，其上其余连着的是原子序数为零的‘假想原子’（phantom），在结构式中用下标的 0（零）表示。常见的碳碳双键、碳碳叁键、羰基和氰基因此可如下图表示：



例：

-CHO > -CH₂OH 因（O,(O),H）>（O,H,H）

-CH(CH₃)₂ > -CH₂CH=CH₂ 因（C,C,H）>（C,H,H）

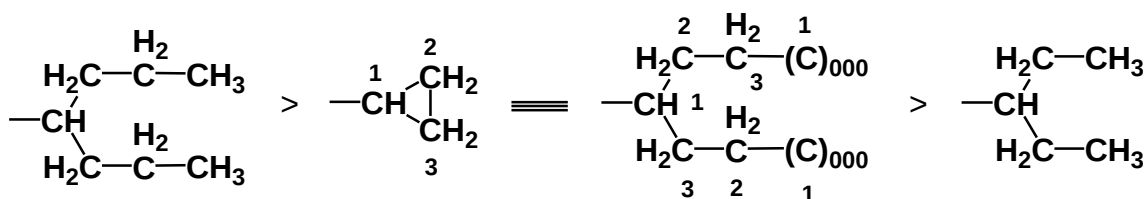
-CH=CH(CH₃) > -CH(CH₃)₂ 因基团第二层级（C,(C),H）=（C,C,H）；第三层级（C,(C),H）

$$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C} & \text{CH}_3 \\ | & | \\ \text{H}_3\text{C}-\text{C} & -\text{C}- \\ | & | \\ \text{H} & \text{CH}_3 \end{array} > \text{H}_7\text{C}_3-\underset{\text{H}}{\text{C}}=\overset{\text{CH}_3}{\text{C}}- \equiv \text{H}_7\text{C}_3-\underset{\text{H}}{\overset{{}^{000}\text{(C)}}{\text{C}}}-\overset{\text{CH}_3}{\underset{\text{(C)}{}^{000}}{\text{C}}}$$

(2) 饱和环和环系的处理

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{c}
 \text{2} \quad \text{3} \\
 \text{H}_2\text{C}-\text{CH}_2 \\
 | \quad \diagup \\
 -\text{CH} \quad \text{4} \quad \text{CH}_2 \\
 | \quad \diagdown \\
 \text{H}_2\text{C}-\text{CH}_2 \\
 \text{6} \quad \text{5}
 \end{array}
 \quad \equiv \quad
 \begin{array}{c}
 \begin{array}{ccccccc}
 & & \text{3} & \text{4} & \text{5} & & \\
 & & \text{H}_2 & \text{H}_2 & \text{H}_2 & & \\
 & \text{2} & \text{C} & \text{C} & \text{C} & \text{6} & \text{1} \\
 & \text{H}_2\text{C}- & & & & \text{C}-(\text{C})_{000} \\
 & | & & & & | & \\
 -\text{CH} & \text{1} & & & & \text{H}_2 & \\
 & | & \text{H}_2 & \text{H}_2 & \text{H}_2 & \text{2} & \text{1} \\
 & \text{H}_2\text{C}- & \text{C} & \text{C} & \text{C} & \text{C}-(\text{C})_{000} \\
 & \text{6} & \text{5} & \text{4} & \text{3} & \text{H}_2 &
 \end{array}
 \end{array}$$

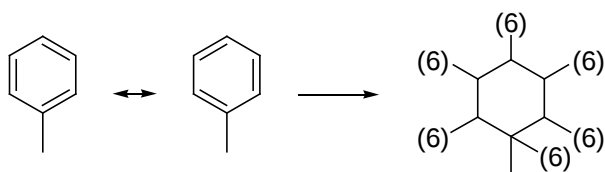
例：



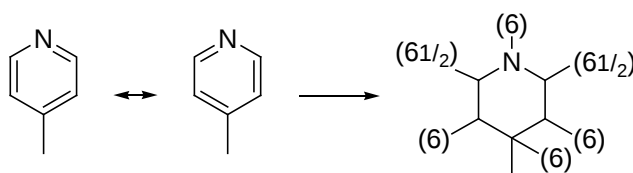
(3) 慢环和慢环环系的处理

12

处理成单键和连有原子序数为(6) (即碳原子) 的‘复制原子’的环, 如下图对苯基的处理。



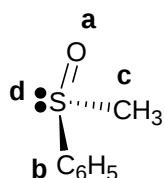
对杂环慢环也可作类似处理, 如对含氮杂环, 邻近氮的碳原子可根据在共振结构中其双键指向氮的几率而加上原子序数为(61/2), (61/3)或(62/3)的‘复制原子’, 如下图对吡啶-4-基的处理。



(4) 对含孤对电子四面体体系的处理

对一些骨架固定含氮化合物中氮原子上的‘孤对电子’以及一些三价磷化合物或四价硫化合物中磷、硫原子上的‘孤对电子’可处理为原子序数为零的‘假想原子’。因此在按顺序规则排列时总是最后。

例:



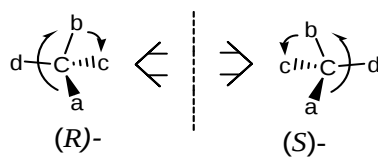
甲基苯基亚砷 (methyl phenyl sulfoxide) 的按顺序规则排列为氧亚基 > 苯基 > 甲基 > 孤对电子 (a > b > c > d)。

7.3.2.2. 手性中心构型的标识

根据 CIP 优先系统 (CIP priority system), 用斜体 *R*, *S* 符号 (*R*, *S* 分别是拉丁文 Rectus, Sinister 意为‘右’, ‘左’的词首字,) 标识手性中心、轴和面诸因素的构型。[现更广泛地称‘立体异构源 (stereogenic)’诸因素构型表示的方法。]

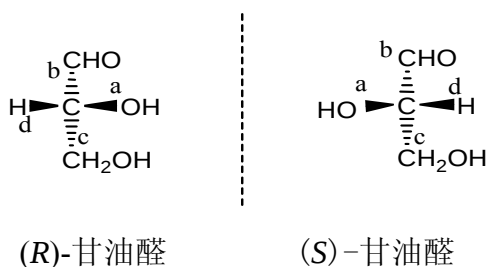
标识手性中心时, 若手性中心连接四个不同的基团按顺序规则排列的先后次序为 a > b > c > d (符号 > 意‘优先于’), 则把 d 作为观察手性中心四面体的最远端, 再看四面体中 a→b→c 的排列顺序, 如顺时针排列, 称为 *R* 构型, 若逆时针排列, 称为 *S* 构型。

型。

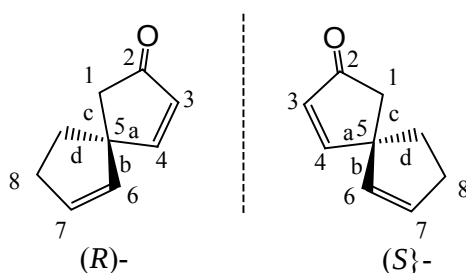


对一个手性中心的分子，将按顺序规则确定的手性中心构型用斜体字母加上刮号置于该化合物名称前作为立体词头 (stereodescriptor) 即可明确表达。

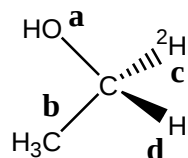
例：甘油醛 (glyceraldehyde) 有一对对映体，它们之间不同构型表达为：(R)- 和 (S)-甘油醛。



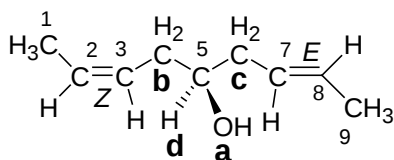
例：一对螺环化合物可分别命名为：(5R)- 和 (5S)-螺[4,4]-壬-3,6 二烯-2-酮 ((5R)- and (5S)-spiro[4,4] nona- 3,6-dien-2-one)



例：手性中心上带有不同同位数的原子时，按顺序规则第二条排列优先的先后次序，下列氘代乙醇手性中心的构型为 *R*，系统命名为：(1*R*)-(1-²H₁) 乙-1-醇 ((1*R*)-(1-²H₁)ethan-1-ol)

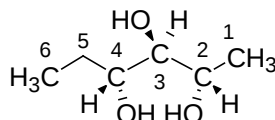


例：手性中心上带有二除构型外相同的烯烃取代基时，按顺序规则第三条排列优先的先后次序 (*Z* > *E*)，下列化合物手性中心的构型为 *R*，因此命名为：(2*Z*,5*R*,7*E*)-壬-2,7-二烯-5-醇 ((2*Z*,5*R*,7*E*)-nona-2,7-dien-5-ol)。

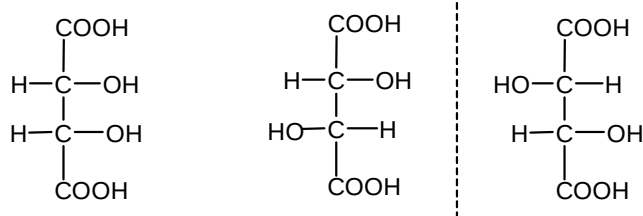


普通化合物有二个或更多手性中心，则可以手性中心位次结合构型符号依次写在化合物名前的括号中。

例：(2*S*,3*S*,4*R*)-己-2,3,4-三醇 ((2*S*,3*S*,4*R*)-hexane-2,3,4-triol)

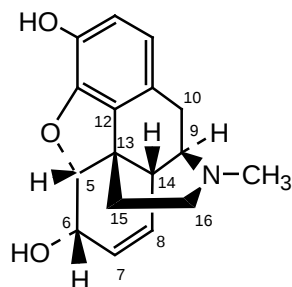
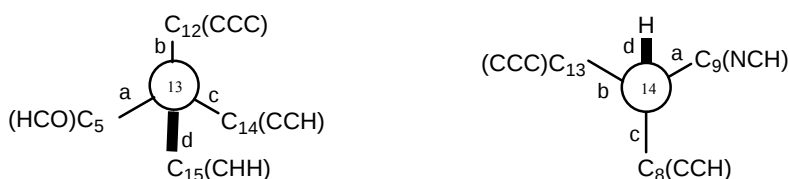


在一个分子中二个手性中心构造相同，例如酒石酸，仅有三个立体异构体，内消旋体二个手性中心构型相反命名为(2*R*,3*S*)-酒石酸。右旋和左旋酒石酸则分别命名为(2*R*,3*R*)- 和 (2*S*,3*S*)-酒石酸。



(2*R*,3*S*)-酒石酸 (2*R*,3*R*)-酒石酸 (2*S*,3*S*)-酒石酸

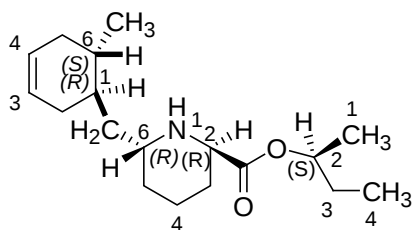
天然吗啡（morphine）是个复杂的生物碱，也能按顺序规则描述它的构型，其杂原子在指引基团优先次序时，很有帮助，在复杂情况时，如 13 和 14 位，可画出手性中心位置周围环境来帮助确定构型。天然吗啡其手性中心的构型为(5*R*,6*S*,9*R*,13*S*,14*R*)。



(5*R*,6*S*,9*R*,13*S*,14*R*)-吗啡

手性中心在化合物的非母体结构上时，其构型标识则置于相应的子结构名称前。

例：



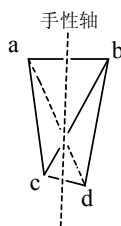
(2*R*,6*R*)-6-([(1*R*,6*S*)-(6-甲基环己-3-烯-1-基)]甲基}哌啶-2-甲酸[(2*S*)-丁-2-酯]

((2*S*)-Butan-2-yl

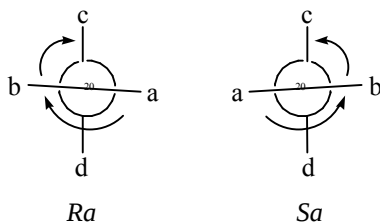
(2*R*,6*R*)-6-([(1*R*,6*S*)-(6-methylcyclohex-3-en-1-yl)]methyl}piperidine-2-carboxylate)

7.3.2.3. 手性轴构型的标识

手性轴是手性中心的延长，由于其结构中的取代基团是拉长的四边形，分子具备手性的条件不再需要四个不同取代基团，仅需 $a \neq b$, $c \neq d$, 即使 $a=c$ 和/或 $b=d$ 时也仍具手性，这类化合物就是手性轴分子。

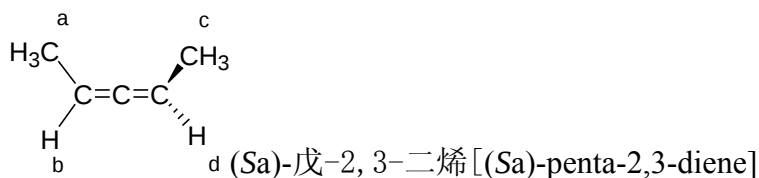


手性轴的构型也可应用“顺序规则”确定，但此时规定近端基团总是优先于远端的基团。这样，近端的二基团为 $a > b$ ，远端的二基团为 $c > d$ 时，从近端观察 $a \rightarrow b \rightarrow c$ 的排列顺序，如顺时针排列，称为(*R*_a)构型，若逆时针排列，称为(*S*_a)构型（*a* 是指轴手性）。其实构型的确定与观察的方向无关，如从反向观察 $c \rightarrow d \rightarrow a$ 的排列顺序则会得出同一的构型结果。



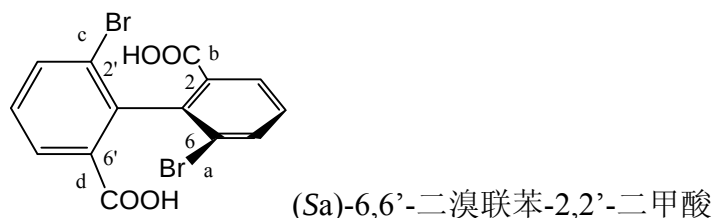
丙二烯类衍生物是手性轴化合物的典型例子。

例：



另一类手性轴化合物的典型例子是取代的联苯化合物。

例：

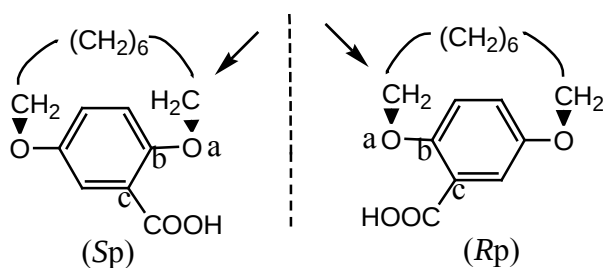


[(Sa)-6,6'-dibromobiphenyl-2,2-dicarboxylic acid]

7.3.2.4. 手性面构型的标识

手性面是手性轴的扩展，但手性面的定义却没有手性轴那么简单明确。一般来讲平面手性是指由于该平面外与其相连基团排列而引起的立体异构现象，如‘柄状化合物’(ansa compounds)，当它的脂链短至苯环不能自由旋转时，它的带取代基的苯环就可认为是手性面。标识手性面化合物的构型也是较为特殊，由手性面外最接近的原子[称为‘引导原子’(pilot atom)]观察(箭头方向)，如最接近的三个原子 a, b, 和 c 是顺时针转为 *R_p*，而反时钟转为 *S_p* (p 是指面手性)。含二个苯环的对环芳烷情况类似，其中带取代基的苯环为手性面。

例：

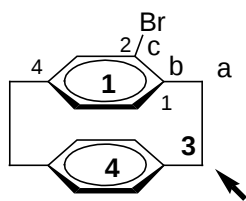


(Sp)-1,10-二氧杂-[10]对环芳烷-12-甲酸

((Sp)-1,10-dioxa-[10]paracyclophane-12-carboxylic acid)

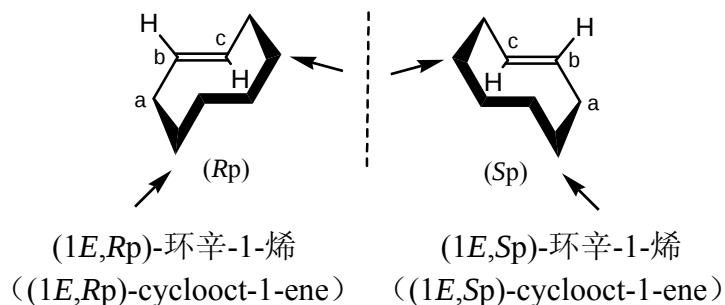
(Rp)-1,10-二氧杂-[10]对环芳烷-12-甲酸

((Rp)-1,10-dioxa-[10]paracyclophane-12-carboxylic acid)

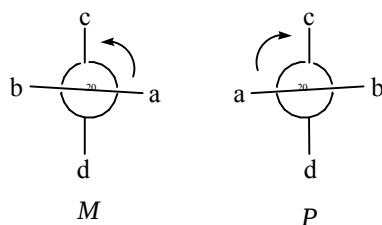


(Sp)-1²-溴-1,4(1,4)-二苯杂环己蕃 ((Sp)-1²-bromo-1,4(1,4)-dibenzenacyclohexaphane)
 (Sp)-4-溴[2.2]对环芳烷 ((Sp)-4-bromo[2.2]paracyclophane)

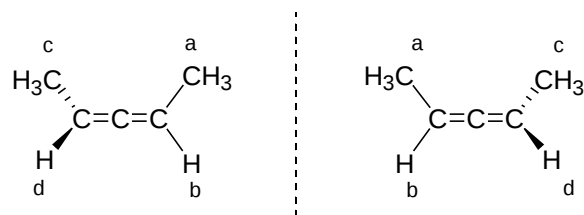
另外一类手性面化合物是反式环烷烯，它的饱和脂链要足够短而使脂链不能在双键面上上下下自由旋转，由此与上述柄状化合物一样存在一对阻转对映异构体 (atropisomer)。如(*E*)-环辛烯 ((*E*)-cyclooctene)，由于它的手性面是包括四个取代原子的双键平面，无需额外取代基，就存在一对对映异构体。构型标识方法同上述柄状化合物，但此时从其二个‘引导原子’中任何一方观察（箭头方向），均得相同的构型标识。



另一种标识有关手性轴和面构型的方法称为‘螺旋规则’ (helicity rule)，它们的构型符号相应变成 *P* (plus) 或 *M* (minus)^[7-6]。这样，手性轴化合物构型的判别较为简单，由手性轴轴向观察，近端的二取代基团为 *a* > *b*，远端的二取代基团为 *c* > *d*，只需直接判别 *a* → *c* 的方向，如果顺时针转为右手螺旋，用符号 *P* 表达，而反时钟转则为左手螺旋，用符号 *M* 表达。



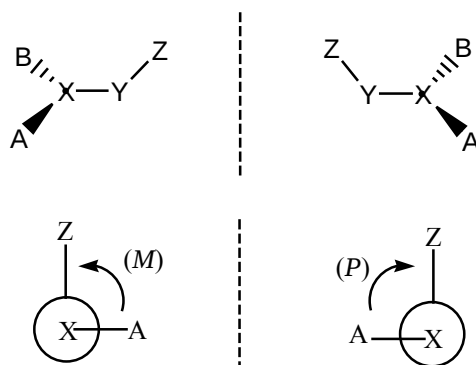
通常，手性轴构型符号(*S*_a)按螺旋规则时变为 *P*，而(*R*_a) 变为 *M*。因此上述手性轴化合物丙二烯的例子 (*S*_a)-戊-2,3-二烯 ((*S*_a)-penta-2,3-diene) 变成(*P*)-戊-2,3-二烯 ((*P*)-penta-2,3-diene)。



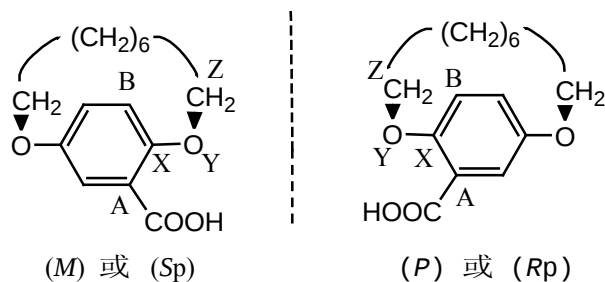
(*P*) 或 (*Sa*)

(*M*) 或 (*Ra*)

手性面化合物如何观察较为复杂，为此，手性面化合物的一对对映体先用五点图画出，其中 *ABY* 为手性面， $A > B$ （按顺序规则），*X-Y* 成键，*Z* 在此面之外。观察 *A-Z* 之间的扭转角，顺时针转为右手螺旋，构型符号用 *P* 表示，反之，为左手螺旋，用 *M* 表示。



通常，手性面构型(*Sp*)按螺旋规则构型表达时变为 *M*，而(*Rp*) 则变为 *P*。如上述‘柄状化合物’的二种构型标识符号。



(*M*) 或 (*Sp*)

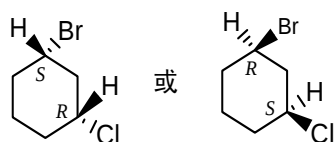
(*P*) 或 (*Rp*)

手性面化合物按‘螺旋规则’判别构型的方法比早期提出的方法似乎简单一点，但目前二种方法仍都在使用。

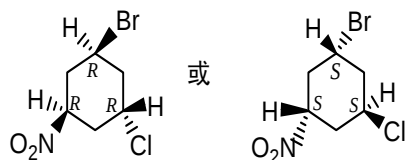
7.3.2.5. 相对构型的标识方法

相对构型已知，而绝对构型未被确定时，用 *R**, *S** 表示，前面加位次编号；在比较复杂情况时，可省去星号，而在立体词头前加 *rel* 表示。

例：



(1*S**,3*R**)-1-溴-3-氯代环己烷 [(1*S**,3*R**)-1-bromo-3-chlorocyclohexane]

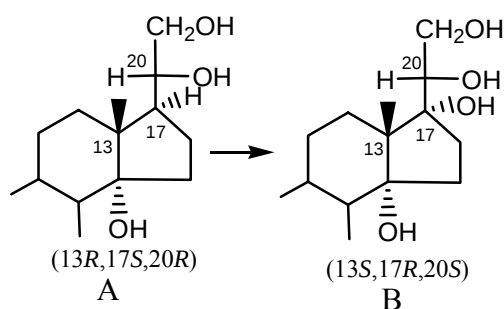


rel-(1*R*,3*R*,5*R*)-1-溴-3-氯-5-硝基环己烷
[*rel*-(1*R*,3*R*,5*R*)-1-bromo-3-chloro-5-nitrocyclohexane]

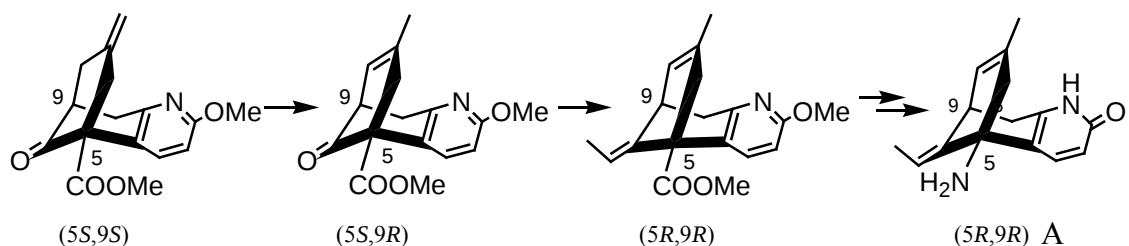
7.3.3. CIP 优先系统使用过程中的弱点

CIP 优先系统曾被推荐用于说明不对称反应的立体过程和产物的相对构型，然而并没有得到有机化学家的普遍接受，原因是在某些场合下会造成一些混乱。顺序规则是依据该手性中心上基团的空间排列格式以及它们的先后顺序来标识构型，因此即使手性中心上基团的排列格式保持不变，仅这些基团或其延伸部份发生变化时，由于对先后顺序的影响，此中心的 CIP 系统构型符号会发生没有规律的变化。在没有立体结构式表达时，仅使用 *R* 或 *S* 符号，特别是一系列的构型相同化合物时，会使科学工作者产生混淆。这是 CIP 优先系统使用过程中的弱点。

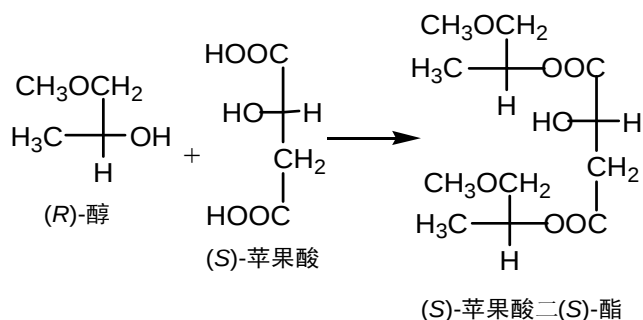
如甾体化合物 **A** 引入 17 α -OH 成甾体化合物 **B** 后，再采用 CIP 系统标识构型时，17-位及周围 13-位和 20-位的三个构型符号都发生了改变。



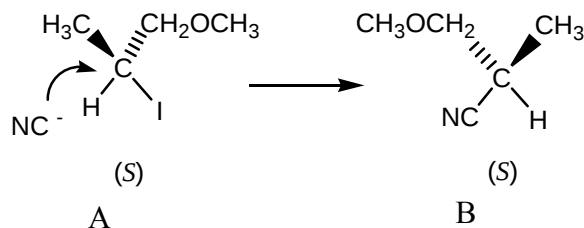
在不对称合成生物碱石杉碱甲 **A** 中，随着合成进展，各中间体附近取代基的改变，就会使石杉碱甲中间体的 5 位和 9 位构型符号发生改变，而实际上该两构型在立体空间上没有发生变化。



(S)-苹果酸和 (R)-3-甲氧基-2-甲基丙醇反应形成的酯是(S)-苹果酸(S)-3-甲氧基-2-甲基丙酯, 因(R)-醇连接到(S)-苹果酸成酯后, 原来醇的(R)-构型在酯中改变成(S)-构型。



通常的 $\text{S}_{\text{N}}2$ 亲核取代反应, 立体化学过程是构型反转, 产物构型符号理应相反。可是用顺序规则描述构型反转时, 其构型符号可能不变。如下面 A 变成 B 的例子。

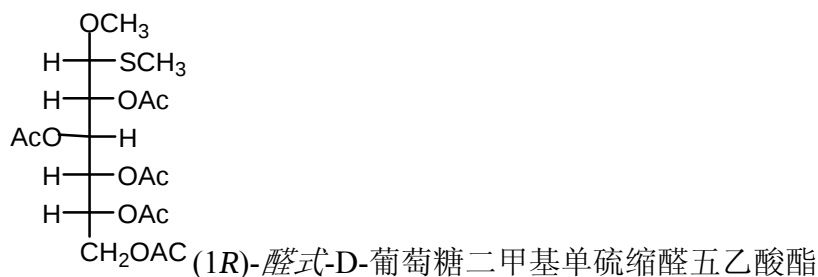


在 L-氨基酸中, 通常是 S 构型, 而 L-半胱氨酸中由于硫原子介入, 使 CH_2SH 优先于 COOH , 成为 R-半胱氨酸。显然在研究一系列类似物时, 尤其研究生物活性和化合物构型关系时, 使用顺序规则标识构型有其欠缺之处。

7.3.4. 综合应用各种系统描述化合物构型

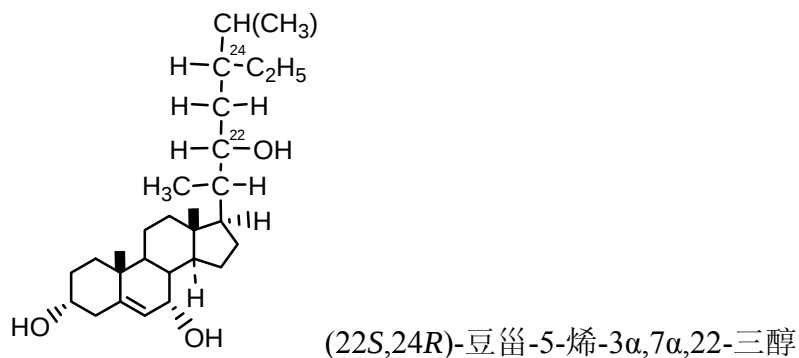
顺序规则 CIP 优先系统是一个普遍的系统, 能应用于任何场合标识各种形式手性因素的构型, 但并没有坚持在各个学科领域都必须使用这一系统, 不必抛弃那些能相当满意表示构型、又能良好显示构型与性能关系的半系统命名。只有在半系统命名不能充分表达时, 才结合顺序规则 CIP 优先系统, 使化合物构型描述更完善。

例:



[(1R)-aldehydo-D-glucose dimethyl monothioacetal pentaacetate]

(1-位醛成单硫缩醛用顺序规则标识为(1R)，再结合 D-葡萄糖俗名进行半系统命名)



[(22S,24R)-stigmast-5-ene-3 α ,7 α ,22-triol]

(豆甾三醇其3 α 和7 α 取代基构型用甾体结构A-D环惯例表达，而侧链上22位和24位的手性中心则采用顺序规则确定的构型表达。)

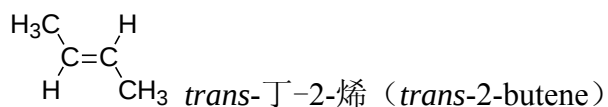
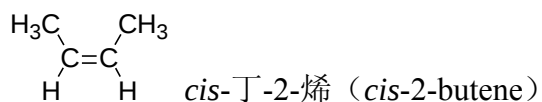
7.4. 双键类异构体标识

过去“双键异构体”常称为“几何异构体”，IUPAC 强力劝阻使用。现代称为的“几何异构体”则扩充至表示所有的各类非对映异构体。“双键异构体”是作为非对映异构体中的一分支。

7.4.1. 双取代双键构型标识

关于双键类化合物异构体的命名，一般双取代的烯烃化合物用 *cis*-或 *trans*-表达是可行的。

例：

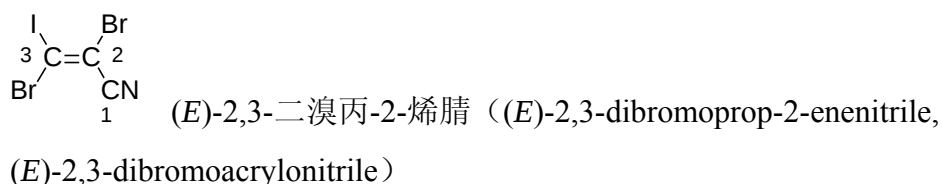
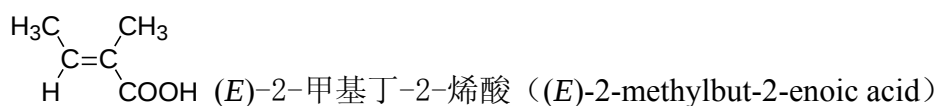


7.4.2. 三或四取代双键构型标识

但是三或四取代双键化合物，用 *cis*-或 *trans*-表达其构型就会含糊不清。而按照“顺序规则”则能明确指明。

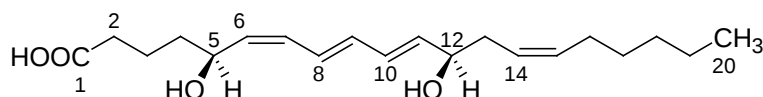
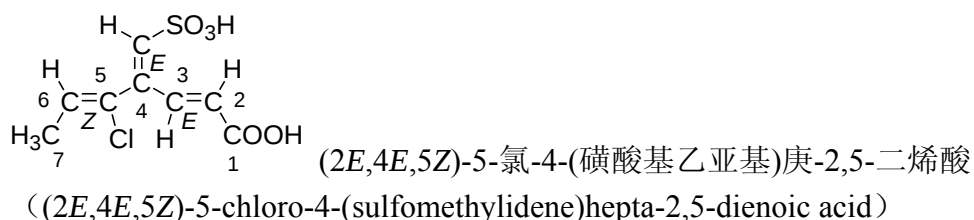
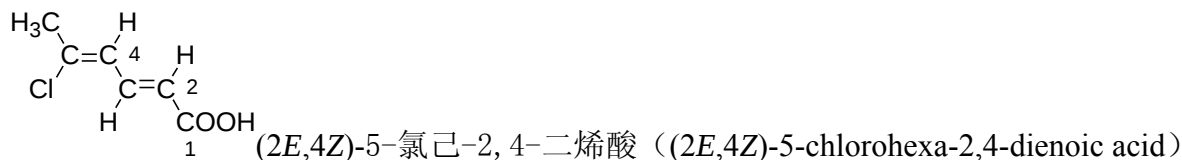
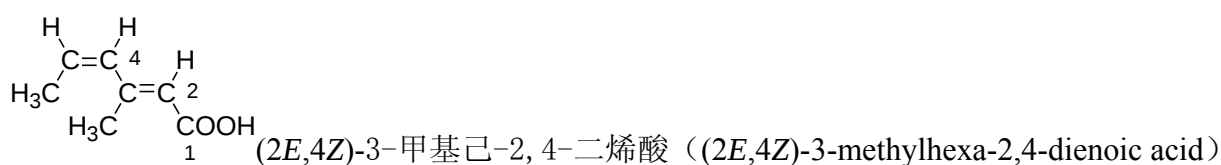
化合物的双键上一个碳原子连接的“较优先”原子或基团与另一个碳原子连接的“较优先”原子或基团，处在双键平面同一侧时为 *Z*-（源于德文 *Zusammen* 首字，意一同）表示；反之，为 *E*-（源于德文 *Entgegen* 首字，意相反）表示，它们通常以斜体加括号作为立体词头写在化合物名称的前面。

例：

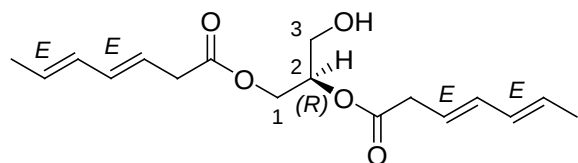


化合物中有几个双键时，将 *Z* 或 *E* 结合双键位置，写在化合物名称的前面，按位次递增排列。如化合物中还包含手性中心，则将所有立体词头按位次递增混合排列在化合物的名称前，或相应的取代基名称前。

例：



(5*S*,6*Z*,8*E*,10*E*,12*R*,14*Z*)-5,12-二羟基二十碳-6,8,10,14-四烯酸
 ((5*S*,6*Z*,8*E*,10*E*,12*R*,14*Z*)-5,12-dihydroxyicosa-6,8,10,14-tetraenoic acid)



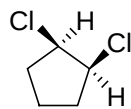
二(3*E*,5*E*)-庚-3,5-二烯酸[(2*R*)-3-羟基丙烷-1,2-叉基]酯
 (2*R*)-3-羟基丙烷-1,2-二醇-1,2-二[(3*E*,5*E*)-庚-3,5-二烯酸酯]
 ((2*R*)-3-hydroxypropane-1,2-diyl di(3*E*,5*E*)-hepta-3,5-dienoate)
 (2*R*)-1,2-二-*O*-[(3*E*,5*E*)-庚-3,5-二烯酰基]甘油
 ((2*R*)-1,2-di-*O*-[(3*E*,5*E*)-hepta-3,5-dienoyl]glycerol)

7.5. 环状化合物异构体标识

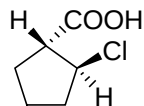
7.5.1. 环状化合物的顺、反异构体标识

单环上二个相邻位置的取代基，其相对立体异构体关系用 *cis*, *trans* 表示，置于化合物名称之前，并加 ‘-’ 符号。

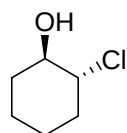
例：



cis-1,2-二氯环戊烷 (*cis*-1,2-dichlorocyclopentane)



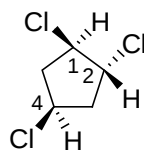
trans-2-氯环戊烷甲酸 (*trans*-2-chlorocyclopentanecarboxylic acid)



trans-2-氯环己-1-醇 (*trans*-2-chlorocyclohexan-1-ol)

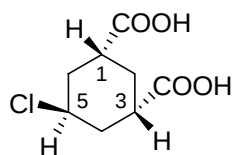
环上有二个以上取代基时，则选定其中位次最低者为对照基团，在其位次前加 ‘*r*’ (relative) 表达，其余取代基位次前用 *cis*-或 *trans*-来表示它们与 ‘对照基团’ 的相互立体关系。IUPAC-2004 建议采用在取代基位次后加 ‘*r*’，‘*c*’ 或 ‘*t*’ 来标识它们的相对构型，此法较为简单明晰，建议中文命名中采用。

例：



1*r*,2*t*,4*c*-三氯环戊烷 (1*r*,2*t*,4*c*-trichlorocyclopentane) — 建议命名

1-*r*,2-*trans*-2,*cis*-4-三氯环戊烷 (1-*r*,2-*trans*-2,*cis*-4-trichlorocyclopentane)



5*t*-氯环己烷-1*r*,3*c*-二甲酸

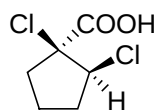
(5*t*-chlorocyclohexane-1*r*,3*c*-dicarboxylic acid) — 建议命名

r-1, *trans*-5-氯, *cis*-3-环己烷-1, 3-二甲酸

(*r*-1, *trans*-5-chlorocyclohexane, *cis*-1,3-dicarboxylic acid)

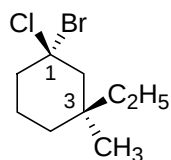
单环化合物同一位置上有二个不同取代基时，则把位次编号最低的，作为名称词尾的取代基定为‘对照基团’；若无取代基作为化合物名称的词尾，则从位次最低的一对取代基中，按顺序规则择选‘较优先基团’为对照基团。对其它位置上取代基，用 *cis* 或 *trans* 来表示它们与对照基团的立体关系。现建议采用在取代基位次后加‘*r*’，‘*c*’或‘*t*’来标识它们的相对构型。

例：



1,2*t*-二氯环戊烷-1*r*-甲酸 (1,2*t*-dichlorocyclopentane-1*r*-carboxylic acid) — 建议命名

1, *trans*-2-二氯-*r*-1-环戊烷甲酸 (1, *trans*-2-dichloro-*r*-1-cyclopentanecarboxylic acid)

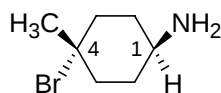


1*r*-溴-1-氯-3*t*-乙基-3*c*-甲基环己烷

(1*r*-bromo-1-chloro-3*t*-ethyl-3*c*-methylcyclohexane) — 建议命名

r-1-溴-1-氯- *trans*-3-乙基-3-甲基环己烷

(*r*-1-bromo-1-chloro-*trans*-3-ethyl-3-methylcyclohexane)



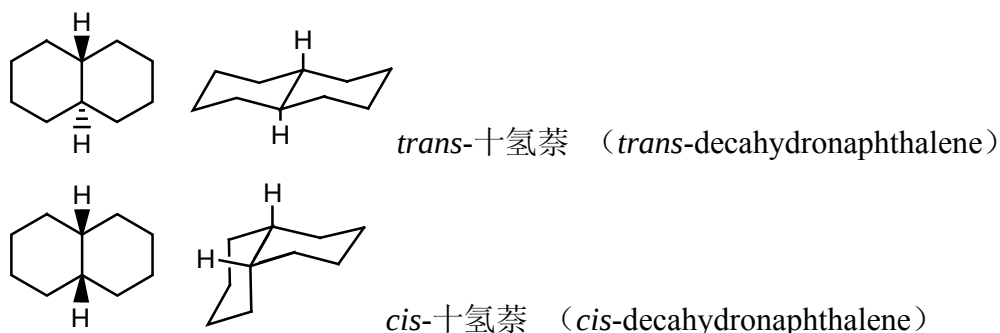
4*t*-溴-4-甲基环己-1*r*-胺 (4*t*-bromo-4-methylcyclohexan-1*r*-amine)

7.5.2. 饱和并环化合物异构体标识

7.5.2.1. 饱和并环化合物的 *cis*、*trans* 异构体

两个环的并环化合物，其连接点 H 原子的取向，用 *cis* 或 *trans* 表示并合方式作为立体词头置于名称前。

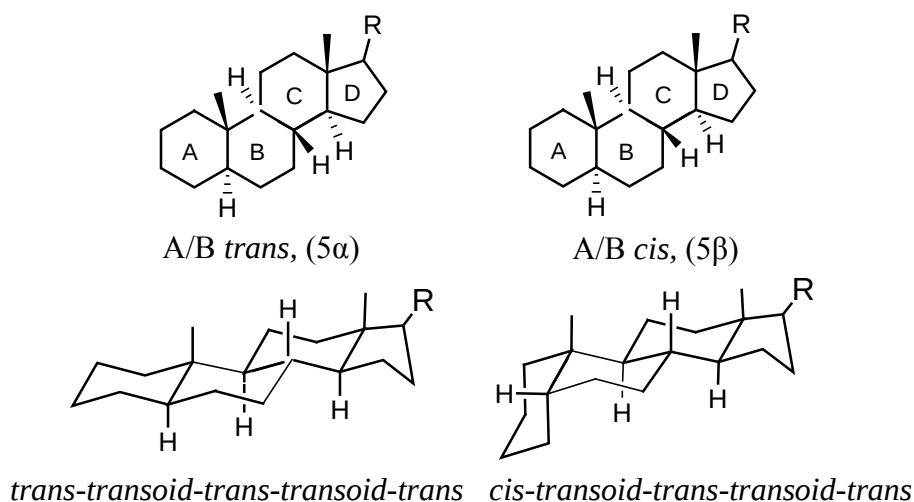
例：十氢化萘的二个六员环能以 *cis*-或 *trans*-方式并合。



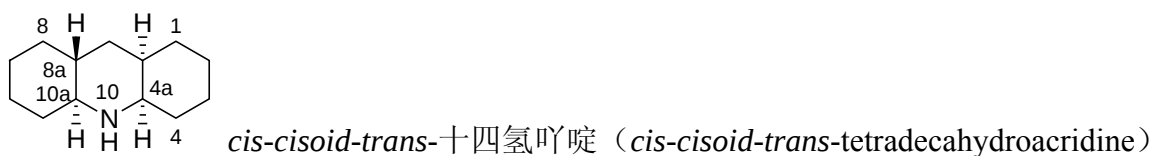
7.5.2.2. 饱和多环并环化合物

当几个环的并环化合物时，除了邻近环连接以 *cis*、*trans* 表示外，多个并环化合物中间隔环之间的连接关系，可按连接间隔两环最近的一对接合点原子（公共原子）的空间取向分为‘顺向’（*cisoid*）、‘反向’（*transoid*）来表示。如二对接合点原子（公共原子）之间的距离相同时，则以低位次的一对来判别它们的‘顺向’（*cisoid*）或‘反向’（*transoid*）。这一相对构型的标识方法 IUPAC-2004 已不再推荐，但在一些领域中，尤其在诸如甾体化合物等的天然产物领域中还在继续使用。

天然产物甾体化合物，通常 A/B 环以 *cis* 或 *trans* 连接，环相互间连接以‘顺向’（*cisoid*）或‘反向’（*transoid*）表示。5 α 系列的甾体化合物 A/B 环以 *trans* 连接，其相对构型为 *trans-transoid-trans-transoid-trans*；5 β 系列的 A/B 环以 *cis* 连接，则相对构型为 *cis-transoid-trans-transoid-trans*。



例：

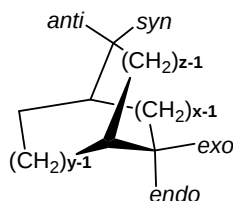


(按 4a 和 10a 间的相对构型定为-*cisoid*-。)

7.5.3. 桥环化合物表达相对构型方式

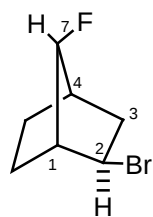
桥环化合物中用 *endo*、*exo*，*syn*、*anti* 表达相对构型方式。

通常，在双环[x,y,z] ($x \geq y > z > 0$) 桥环化合物中非桥头原子上的各个取代基相对定位的表示如下：



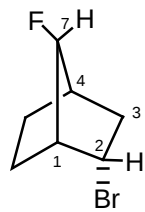
如取代基朝向最高位次数桥（如下化合物图中 z 桥的 C-7）称为 *exo*，远离最高位次数桥（如下化合物图中 z 桥的 C-7）称为 *endo*。取代基在最高位次数桥端朝向最低位次数桥（如下化合物图中 x 桥的 2-位）称为 *syn*，取代基在最高位次数桥端远离最低位次数桥（如下化合物图中 x 桥的 2-位）称为 *anti*。

例：



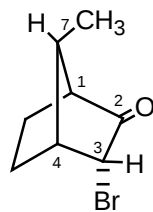
(2-*exo*,7-*syn*)-2 溴-7-氟-双环[2.2.1]庚烷

((2-*exo*,7-*syn*)-2-bromo-7-fluorobicyclo[2,2,1]heptane)



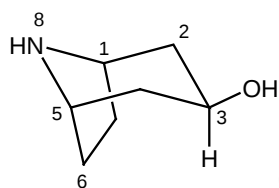
(2-*endo*,7-*anti*)-2 溴-7-氟-双环[2.2.1]庚烷

((2-*endo*,7-*anti*)-2-bromo-7-fluorobicyclo[2,2,1]heptane)



(3-*endo*,7-*syn*)-3-溴-7-甲基双环[2,2,1]庚-2-酮

((3-*endo*,7-*syn*)-3-bromo-7-methylbicyclo[2,2,1]heptan-2-one)



(3-*exo*)-8-氮杂双环[3.2.1]辛-3-醇

((3-*exo*)-8-azabicyclo[3.2.1]octan-3-ol)

参考文献

- [7-1] Moss, G. P. Basic terminology of stereochemistry, (IUPAC Recommendations 1996) *Pure Appl. Chem.* **1996**, 68, 2193-2222.
- [7-2] Eliel, E. L., Wilen, S. H., Doyle, M. P. 'Heterotopic ligands and faces: prostereoisomerism and prochirality' in "Basic organic stereochemistry" Chap. 8, Wiley-Interscience, New York, **2001**. 中译本: 邓 并主译 "基础有机立体化学" 第八章, 科学出版社, 北京, **2005**.
- [7-3] Mislow, K.; Segel, J. J. *J. Am. Chem. Soc.*, **1984**, 106, 3319-3328.
- [7-4] Brecher, J. Graphic representation of stereochemical configuration , (IUPAC Recommendations 2006). *Pure Appl. Chem.* **2006**, 78, 1897-1970.
- [7-5] Cahn, R. S.; Ingold, C. K.; Prelog, V.. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, **1966**, 5, 385-415.
- [7-6] Prelog, V.; Helmchen, G.. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, **1982**, 21, 567-583.

第 8 章 天然产物 (Natural Products) [1,2]

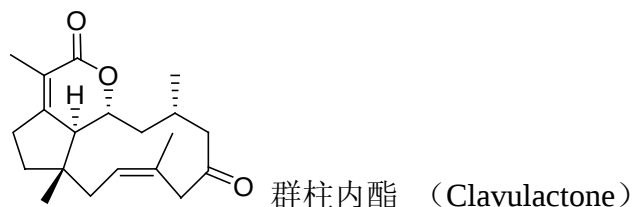
由生物体中分得的天然产物化合物的命名是有机化合物命名中较为特殊的一类，通常一个较复杂的天然产物可能三个类型的名称，即俗名、系统名和半系统名：

1, **俗名** 从天然来源分离到一个化合物，结构未知或甚至结构确定后，通常都会给它定一名称，也即为俗名。俗名一般取自于天然来源生物体的名称，英文中常用该生物体的名称或者其拉丁学名中的种名或属名为词根，再加以适当的词尾，表示该化合物的特征结构或基团，当有多个类似结构的情况时，还可冠以 α , β , γ ...或后加 A, B, C...。中文俗名的取名也建议按此习惯，种属名采用生物分类学名词的规定，尽量不要音译，词尾用素或其它表示特征结构或基团的名称，当有多个类似结构时，再加甲、乙、丙、丁、……等字样。

例：



来源：中药虎耳草科植物常山 (*Dichroa febrifuga* Lour.)

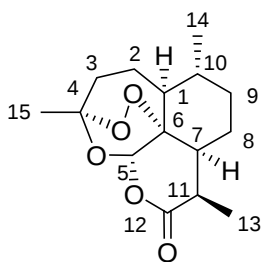


来源：软珊瑚群柱虫 (*Clavularia viridis*)

2, **系统名** 即按前面几章所述规则进行命名，但一般由此得出的名称十分繁复，实际交流中较少使用。

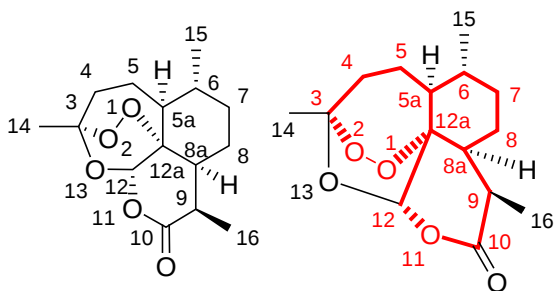
3, **半系统名** 在一些常见的天然产物类别中已确定出一系列它们各自共同的母体结构，并给予了名称（包括位次编号体系和一些结构中的立体化学）。对于需命名的天然产物则先从其结构中确定出与已知天然产物相对应的母体结构，再在此结构名称的基础上按系统命名方法进行命名，从而得出其半系统命名。

例：



俗名 青蒿素 (Qinghaosu, Artemisinin, Arteannuin)

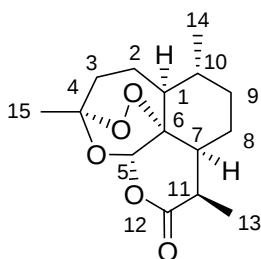
来源: 中药青蒿 (植物—黄花蒿) (*Artemisia annua* L.)。



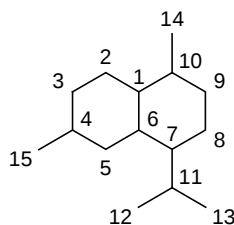
系统名 (3*R*,5*aS*,6*R*,8*aS*,9*R*,12*S*,12*aR*)-八氢-3,12-氧桥-3,6,9-三甲基-12*H*-吡喃并[4,3-*j*]-1,2-苯并二氧庚环-10(3*H*)-酮

((3*R*,5*aS*,6*R*,8*aS*,9*R*,12*S*,12*aR*)-octahydro-3,12-epoxy-3,6,9-trimethyl-12*H*-pyrano[4,3-*j*]-1,2-benzodioxepin-10(3*H*)-one)

(青蒿素结构中的并环母体氢化物为吡喃并[4,3-*j*]-1,2-苯并二氧庚环(上结构式中粗线条部份, 其中并环主体为二氧庚(曼)环, 一级拼合体为苯环, 二级拼合体为吡喃)。)



母体氢化物
—杜松烷
(cadinane)



半系统名 (1*S*,4*R*,5*S*,6*R*,7*S*,10*R*,11*R*)-4,6-过氧桥-4,5-氧桥-4,5-断-杜松烷-12,5-内酯
((1*S*,4*R*,5*S*,6*R*,7*S*,10*R*,11*R*)-4,6-epidioxy-4,5-epoxy-4,5-seco-cadinano-12,5-lactone)

(青蒿素结构中相对应的母体结构为萜类倍半萜中的母体氢化物杜松烷 (cadinane)。)

天然产物半系统命名时, 和一般化合物的系统命名类似, 有两种类型的母体结构:

(1) 母体氢化物 采用此类母体进行半系统命名的有如生物碱、萜类以及多数甾体的母体结构等。

(2) 官能性母体 由此进行半系统命名的天然产物如氨基酸和多肽、糖、核苷和核苷酸等。

本章以下各节将列出一些主要天然产物类别中当今较通用的母体结构, 它们的名称、位次编号体系以及由此进行半系统命名时较特殊的或已形成习惯的规则。母体的名称和位次编号体系按 IUPAC 建议的规定, IUPAC 建议中未列入的类别则按该领域的传

统习惯进行定名和编号。本章中未包括的其它类型天然产物可参照本章的方式确定母体结构，再进行半系统命名。

[1] IUPAC Recommendations 1999: Revised Section F: Natural Products and Related Compounds, *Pure Appl. Chem.* **1999**, 71, 587-643.

[2] Chapter 10 Parent structures for natural products and related compounds. 见 Favre, H.; Powell, W. ‘Preferred names in the nomenclature of organic compounds’ (Provisional recommendations 2004),

http://www.iupac.org/fileadmin/user_upload/publications/recommendations/CompleteDraft.pdf

Favre, H. A.; Powell, W. H. ‘Nomenclature of Organic Chemistry – IUPAC Recommendations and Preferred Names 2013’, Royal Society of Chemistry, **2014**.

8.1. 生物碱 (alkaloid)

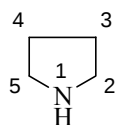
生物碱为天然来源的含氮有机化合物。但不包括小分子生物胺、氨基酸、氮杂糖、氨基糖、蛋白质、核酸、抗生素、维生素以及其他含氮的非生物碱化合物，如吡唑类、噁唑类、异噁唑类、嘧啶类、吡嗪类、喋啶类、卟啉类、氰酸/氰苷类、己内酰脲类 (hydantoin) 和辣椒素类等。绝大多数生物碱具有氮杂环和碱性。早年主要来自于植物，后来从真菌、海洋生物等中也有不少生物碱分得。

生物碱的结构类型繁多，有多种分类方法，其中以生源结合化学分类比较合理。这里，列出 19 大类 85 小类较常见的生物碱母体氢化物或官能性母体。由各类生物碱母体氢化物衍生化合物的半系统命名按前述命名通则进行。

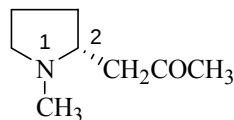
8.1.1. 吡咯烷类 (Pyrrolidines)

8.1.1.1. 吡咯烷类 (Pyrrolidines)

母体氢化物：吡咯烷 (pyrrolidine)



例：



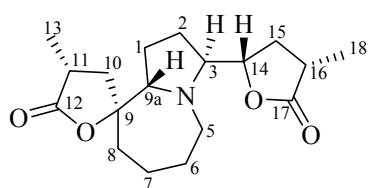
半系统命名：(R)-1-(1-甲基-吡咯烷-2-基)-丙-2-酮

((R)-1-(1-methyl-pyrrolidin-2-yl)-propan-2-one)

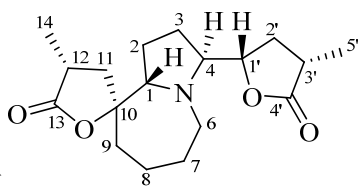
俗名：(+)-古豆碱 ((+)-hygrine)

8.1.1.2. 金刚大碱类 (Croomines)

官能性母体：金刚大碱 (croomine)



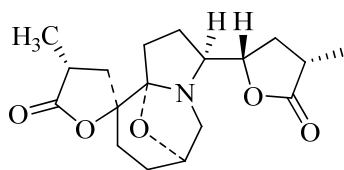
或



[注]

注：编号系统按 *Nat. Prod. Commun.* **2014**, 9(12), 1809-1822.

例:

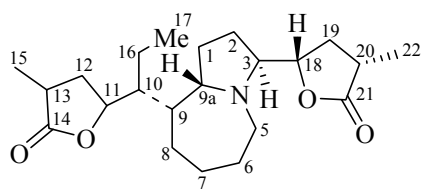


半系统命名: 6,9 α -氧桥金刚大碱 (6,9 α -epoxy-croomine) 或 1,7-氧桥金刚大碱 (1,7-epoxy-croomine)

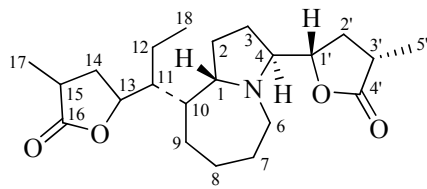
俗名: 滇百部碱 (stemotinine)

8.1.1.3. 百部新碱类 (Stemoninines)

官能性母体: 百部新碱 (stemoninine)



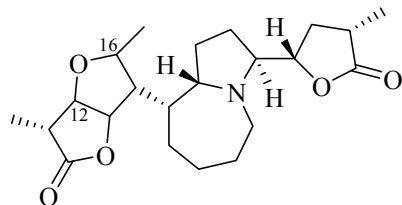
或



[注]

注: 编号系统按 *Nat. Prod. Commun.* **2014**, 9(12), 1809-1822.

例:

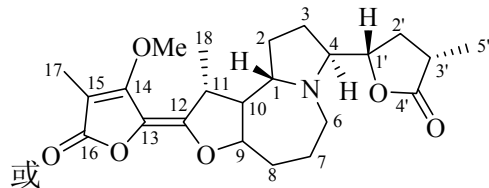
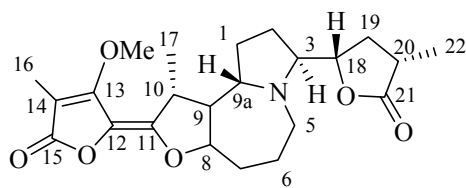


半系统命名: 12,16-氧桥-百部新碱 (12,16-epoxy-stemoninine) 或 12,14-氧桥-百部新碱 (12,14-epoxy-stemoninine)

俗名: 细花百部碱 (parvistemonine)

8.1.1.4. 原百部碱类 (Protostemonines)

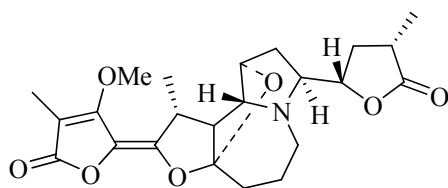
官能性母体: 原百部碱 (prtostemonine)



[注]

注: 编号系统按 *Nat. Prod. Commun.* **2014**, 9(12), 1809-1822.

例：

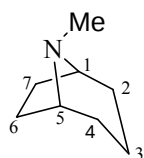


半系统命名：1,8-氧桥原百部碱 (1,8-epoxyprotostemonine) 或 2,9-氧桥原百部碱 (2,9-epoxy-protostemonine)

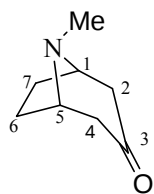
俗名：氧化原百部碱 (oxyprostemonine)

8.1.2. 莨菪碱类 (Tropane alkaloids, Tropine alkaloids) (Tropanes)

母体氢化物：莨菪烷（托品烷） (tropane)



例：



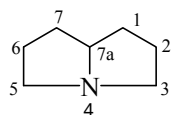
半系统名：(1*S*,5*R*)-莨菪烷-3-酮 ((1*S*,5*R*)-tropan-3-one)

俗名：托品酮，颠茄酮 (tropinone)

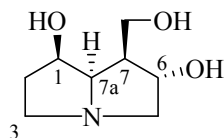
8.1.3. 六氢吡咯嗪类（吡咯里西啶类） (Pyrrolizidines)

8.1.3.1. 六氢吡咯嗪类（吡咯里西啶类） (Pyrrolizidines)

母体氢化物：六氢吡咯嗪（吡咯嗪烷）(hexahydropyrrolizine) ——系统命名（吡咯里西啶）(pyrrolizidine)



例：



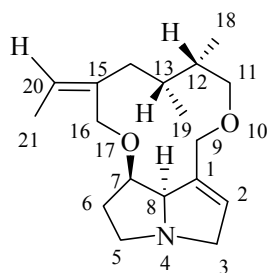
系统名: (7aR)-r-7a,trans-7-羟甲基-六氢吡咯嗪- trans-1,cis-6-二醇

((7aR)-(7ar)-7t-Hydroxymethyl-hexahydro-pyrrolizin-1t,6c-diol)

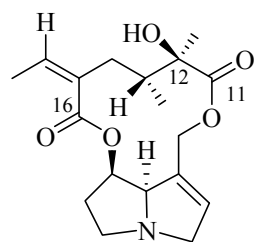
俗名: 迷迭香裂碱 (rosmarinecine)

8.1.3.2. 千里光烷类 (Senecionans)

母体氢化物: 千里光烷 (senecionan)



例:

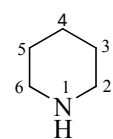


半系统名: 12 β -羟基-千里光烷-11,16-二酮 (12 β -hydroxy-senecionan-11,16-dione)

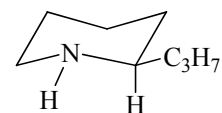
俗名: 千里光碱 (senecionine)

8.1.4. 哌啶类 (Piperidines)

母体氢化物: 哌啶 (piperidine) —— 系统命名



例:



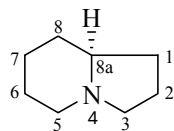
系统名: 2R-丙基-哌啶 (2 β -propylpiperidine)

俗名: R-可尼因 (R-coniine)

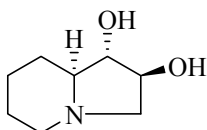
8.1.5. 八氢吲哚啉[类]生物碱（吲哚里西啉类）(Indolizidines)

8.1.5.1. 八氢吲哚啉类(octahydroindolizines)(吲哚里西啉类(indolizidine))

母体氢化物：八氢吲哚啉（吲哚啉烷）(octahydroindolizine)——系统命名（吲哚里西啉(indolizidine)）



例：

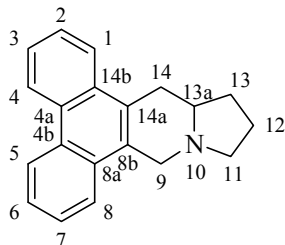


半系统名：(1S,2S,8aS)-八氢吲哚啉-1,2-二醇（(1S,2S,8aS)-octahydroindolizin-1,2-diol）

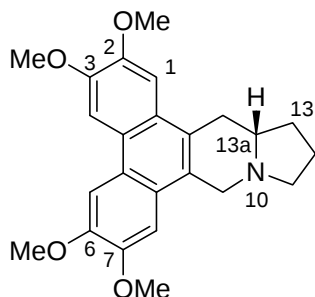
俗名：斑莢素(lentiginosine)

8.1.5.2. 菲并吲哚啉[类]生物碱（菲并吲哚里西啉类）(Phenanthroindolizidines)

母体氢化物：六氢菲并吲哚啉(hexahydrophenanthroindolizine)



例：



半系统名：(S)-2,3,6,7-四甲氧基六氢菲并吲哚啉

（(S)-2,3,6,7-tetramethoxyhexahydrophenanthroindolizine）

(13aS)-2,3,6,7-四甲氧基-9,11,12,13,13a,14-六氢菲并[9,10-*f*]吲哚啉

（(13aS)-2,3,6,7-tetramethoxy-9,11,12,13,13a,14-hexahydrophenanthro[9,10-*f*]indolizine）

俗名：娃儿藤碱(tylophorine)

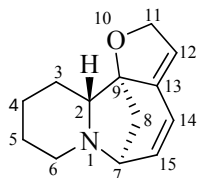
附系统名：(S)-2,3,6,7-四甲氧基-9,11,12,13,13a,14-六氢-二苯并[*f,h*]吡咯[1,2-*b*]并异喹啉

（(S)-2,3,6,7-tetramethoxy-9,11,12,13,13a,14-hexahydro-dibenzo[*f,h*]pyrrolo[1,2-*b*]isoquinoli

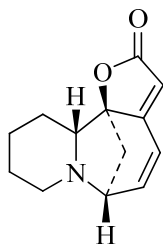
ne)

8.1.5.3. 一叶萩碱类 (Securinega alkaloids, Securines)

母体氢化物：一叶萩烷 (securinan)



例：



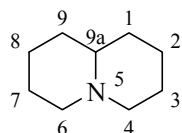
半系统名：一叶萩烷-11-酮 (securinan-11-one)

俗名：一叶萩碱 (securinine)

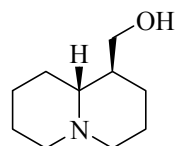
8.1.6. 八氢喹啉[类]生物碱 (喹诺里西啉类) (Quinolizidines)

8.1.6.1. 八氢喹啉[类]生物碱 (octahydroquinolizines)

母体氢化物：八氢喹啉 (喹啉烷) (octahydroquinolizine)



例：

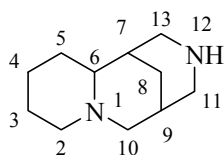


半系统名：(9aR)-(9ar)-八氢喹啉-1c-甲醇 ((9aR)-(9ar)-octahydro-quinolizine-1c-methanol)

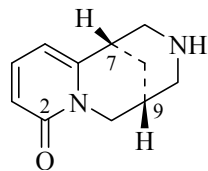
俗名：羽扇豆碱 (lupinine)

8.1.6.2. 金雀花碱类 (Cytisines)

母体氢化物：金雀花烷 (cytisan)



例:



半系统名: (7*S*,9*R*)-3,4,5,6-四脱氢金雀花烷-2-酮

((7*S*,9*R*)-3,4,5,6-tetrahydrocytisan-2-one)

俗名: 金雀花碱 (cytisine)

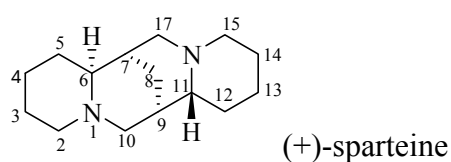
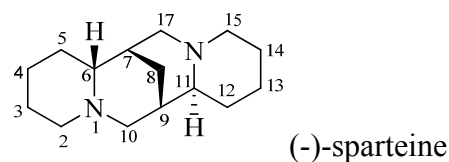
附系统名: (1*R*,5*S*)-1,2,3,4,5,6-六氢-1,5-甲桥吡啶并-[1,2-*a*][1,5]二氮杂辛(慢)环-8-酮

((1*R*,5*S*)-1,2,3,4,5,6-hexahydro-1,5-methanopyrido-[1,2-*a*][1,5]diazocin-8-one)

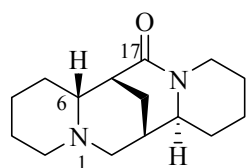
8.1.6.3. 鹰爪豆碱类 (Sparteines)

母体氢化物: 鹰爪豆碱 (sparteine)

鹰爪豆碱 (sparteine)是一个具 C₂ 对称轴的分子, IUPAC 建议以(-)-鹰爪豆碱((-)-sparteine), 即绝对构型为 6*R*,7*R*,9*R*,11*S* 的分子, 为母体氢化物。因此(+)-鹰爪豆碱((+)-sparteine)也可称对映-鹰爪豆碱((ent-sparteine)。

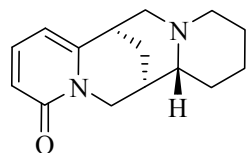


例:



半系统名: 鹰爪豆碱-17-酮 (spatein-17-one); 17-氧亚基-鹰爪豆碱 (17-oxo-sparteine)

俗名: 17-氧鹰爪豆碱 (17-oxosparteine, aphylline)

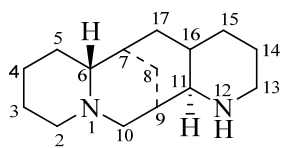


半系统名: 对映鹰爪豆碱-3,5-二烯-2-酮 (ent-sparteine-3,5-dien-2-one)

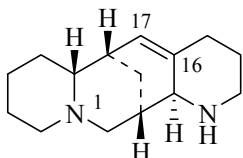
俗名: 臭豆碱 ((-)-anagyrine, (-)-rhombinine)

8.1.6.4. 苦豆碱类 (Aloperines)

母体氢化物：苦豆烷 (aloperan)



例：

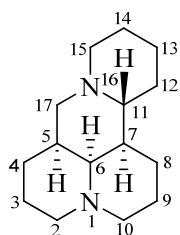


半系统名：16,17-双脱氢苦豆烷 (16,17-didehydroaloperan)

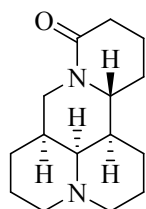
俗名：苦豆碱 (aloperine)

8.1.6.5. 苦参碱类 (Matrines)

母体氢化物：苦参烷 (matridine)



例：

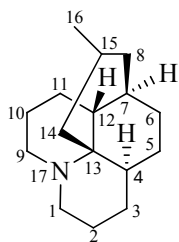


半系统名：(-)-苦参烷-15-酮 (matridin-15-one)

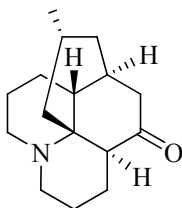
俗名：苦参碱 (matrine)

8.1.6.6. 石松碱类 (Lycopodines)

母体氢化物：石松烷 (lycopodane)



例：

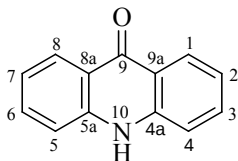


半系统名：(15R)-石松烷-5-酮 ((15R)-lycopodan-5-one)

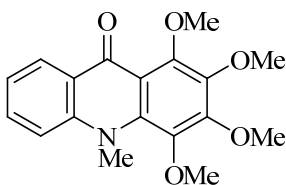
俗名：石松碱 (lycopodine)

8.1.7. 吡啶酮类 (Acridinones)

官能性母体：吡啶酮 (acridinone)



例：



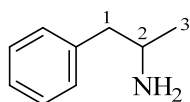
半系统名：1,2,3,4-四甲氧基-10-甲基-吡啶酮 (1,2,3,4-tetramethoxy-10-methyl-acridinone)

俗名：密茱萸生碱 (melicopicine)

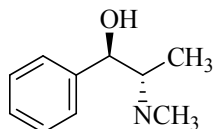
8.1.8. 苯丙胺类 (Phenylpropylamines)

苯丙胺类生物碱也有称作麻黄碱类生物碱 (Ephedra bases)，母体为苯丙-2-胺，结构简单，其衍生物除俗名外可直接采用系统命名。本类生物碱中的最代表性的化合物为麻黄碱。

母体氢化物：苯丙-2-胺 (Phenylpropyl-2-amine)



例:



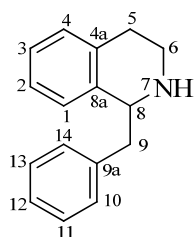
系统名: (1R, 2S)- 2-甲氨基-1-苯基丙-1-醇 ((1R, 2S)-2-methylamino-1-phenylpropan-1-ol)

俗名: 麻黄碱 (ephedrine)

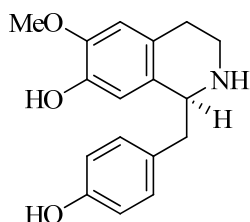
8.1.9. 苄基四氢异喹啉类 (Benzyltetrahydroisoquinolines)

8.1.9.1. 苄基四氢异喹啉类 (Benzyltetrahydroisoquinolines)

母体氢化物: 苄基四氢异喹啉 (Benzyltetrahydroisoquinoline)



例:



半系统名: (8S)-3-甲氧基-苄基四氢异喹啉-2,12-二醇

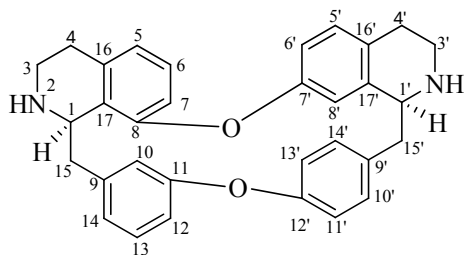
((8S)-3-methoxy-benzyltetrahydroisoquinolin-2,12-diol)

俗名: 乌药碱 (coclaurine)

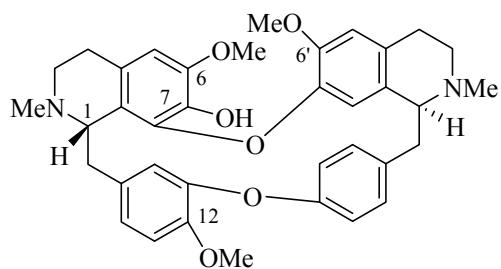
8.1.9.2. 双苄基四氢异喹啉类 (Bisbenzyltetrahydroisoquinolines)

8.1.9.2.1. 小檗胺烷类 (Berbamans)

母体氢化物: 小檗胺烷 (berbaman)



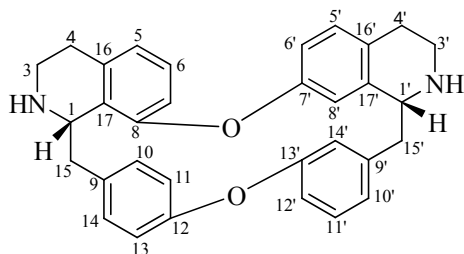
例:



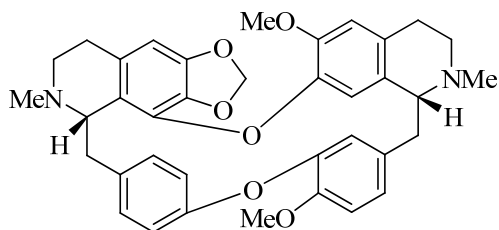
半系统名: 6,6',12-三甲氧基-2,2'-二甲基-小檗胺烷-7-醇
(6,6',12-trimethoxy-2,2'-dimethyl-1 β H-berbaman-7-ol)
俗名: 防己诺林 (fangchinoline)

8.1.9.2.2. 氧卡萨烷类 (Oxycanthans)

母体氢化物: 氧卡萨烷 (oxycanthan)



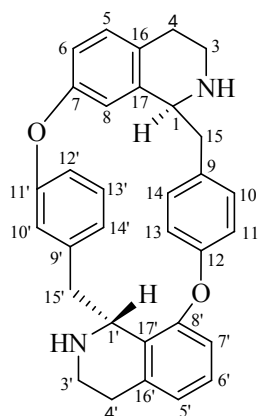
例:



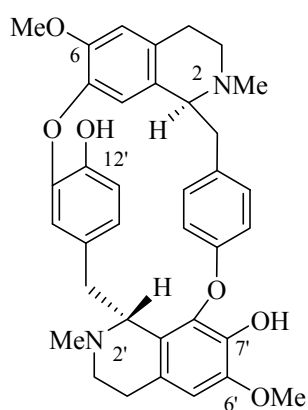
半系统名: 6',12'-二甲氧基-6,7-甲叉二氧基-2,2'-二甲基-氧卡萨烷
(6',12'-dimethoxy-6,7-methylenedioxy-2,2'-dimethyl-oxycanthan)
俗名: 头花千金藤碱 (cepharanthine)

8.1.9.2.3. 筒箭烷类(Tubocurans)

母体氢化物: 筒箭烷 (tubocuraran)



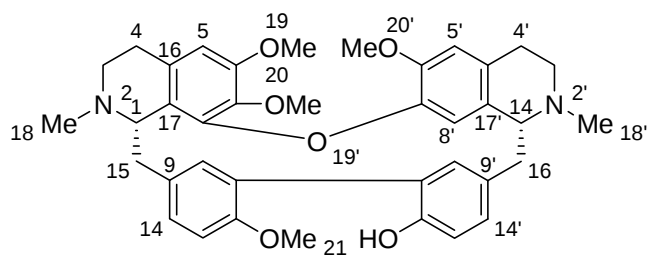
例:



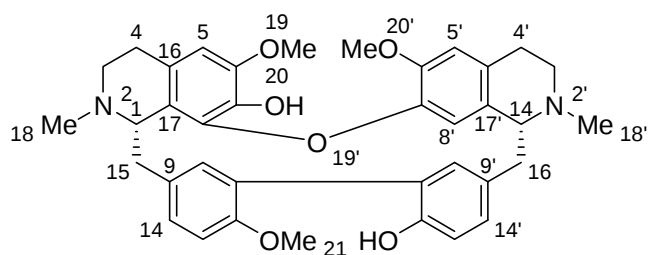
半系统名: 6,6'-二甲氧基-2,2'-二甲基筒箭烷-7',12'-二醇
(6,6'-dimethoxy-2,2'-dimethyl-tubocurarine-7',12'-diol)
俗名: 筒箭毒碱(tubocurine, chondocurine)

8.1.9.2.4. 罗地辛碱 (Rodiasine)

母体氢化物: 罗地辛碱 (Rodiasine)



例:

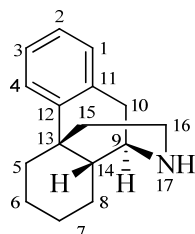


半系统名: 20-O-脱甲基罗地辛碱 (20-O-demethylrodiasine)

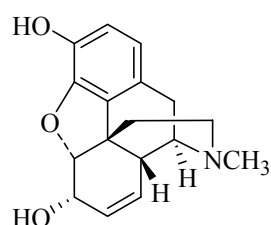
俗名：右旋反喹因碱 ((+)-antiquine)

8.1.9.3. 吗啡碱类 (Morphines)

母体氢化物：吗啡烷 (morphinan)



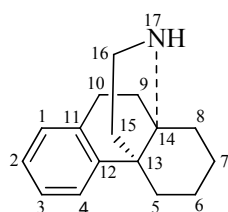
例：



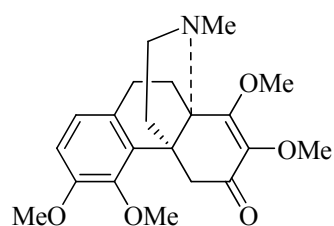
半系统名：*N*-甲基-4,5 α -环氧-7,8-二去氢吗啡烷-3,6 α -二醇
(*N*-methyl-4,5 α -epoxy-7,8-dehydromorphinan-3,6 α -diol)
俗名：吗啡碱 (morphine)

8.1.9.4. 莲花烷碱类 (Hasubanonines)

母体氢化物：莲花烷 (hasubanan)



例：

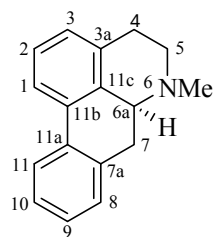


半系统名：*N*-甲基-3,4,7,8-四甲氧基-莲花烷-7-烯-6-酮
(*N*-methyl-3,4,7,8-tetramethoxy-hasuban-7-en-6-on)

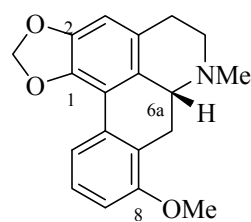
俗名：莲花碱 (hasubanone)

8.1.9.5. 阿朴菲碱类 (Aporphines)

母体氢化物：阿朴菲 (aporphine)



例：

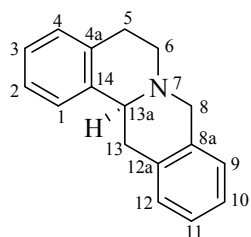


半系统名：6aβ-8-甲氧基-1,2-甲叉二氧基-阿朴菲
(6aβ-8-methoxy-1,2-methylenedioxy-aporphine)

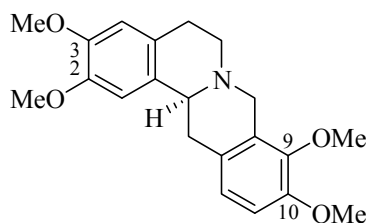
俗名：千金藤碱 (stephanine)

8.1.9.6. 原小蘖碱类 (Protoberberines)

母体氢化物：小蘖烷 (berbine)



例：

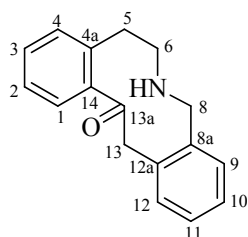


半系统名：(13aS)-2,3,9,10-四甲氧基-小蘖烷 ((13aS)-2,3,9,10-tetramethoxyberbin)

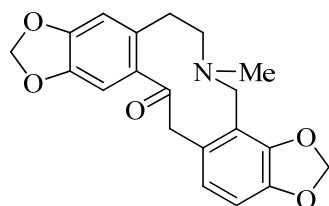
俗名：(S)-(-)-四氢巴马亭 ((S)-(-)-tetrahydropalmatine)

8.1.9.7. 原托品类（普罗托品类） (Protopines)

母体氢化物：7,13a-断-小蘖烷 (7,13a-seco-berbine)



例：

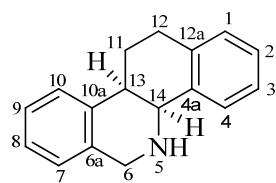


半系统名：N-甲基-2,3:9,10-双甲叉二氧基-7,13a-断-小蘖烷
(*N*-methyl-2,3:9,10-bis-methylenedioxy-7,13a-secoberbine)

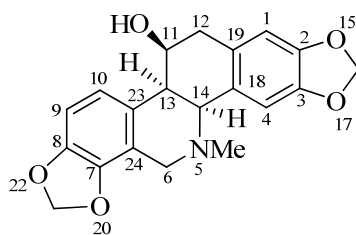
俗名：原托品碱，普罗托品 (protopine)

8.1.9.8. 苯菲啶碱类 (Benzophenanthridines)

母体氢化物：六氢苯并菲啶 (hexahydrobenzophenanthridine) (I)或白屈菜碱(chelidone) (II) (IUPAC)

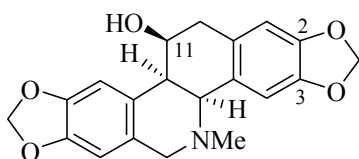


(I)



(II) (IUPAC)

例：



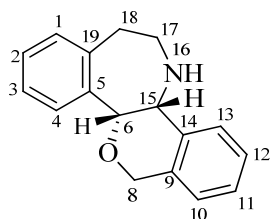
半系统名：(+)-N-甲基-2,3:8,9-双甲叉二氧基-六氢苯并菲啶-11-醇

(*(+)*-*N*-methyl-2,3:8,9-bismethylenedioxy-hexahydrobenzophenanthridin-11-ol)

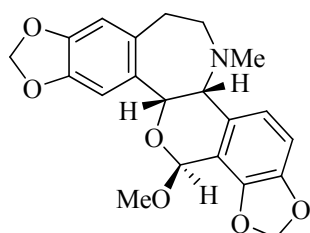
俗名：(+)-白屈菜碱 ((+)-chelidone)

8.1.9.9. 丽春花碱类 (Rhoeadines)

母体氢化物：丽春花烷 (rheadan)



例：

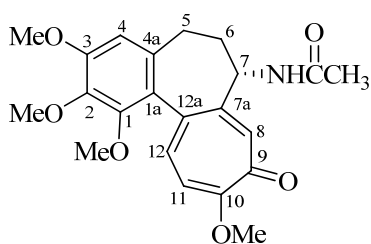


半系统名：*N*-甲基-8β-甲氧基-2,3:10,11-双甲叉二氧基丽春花烷
(*N*-methyl-8β-methoxy-2,3:10,11-bismethylendioxy-rheadan)
俗名：丽春花碱 (rhoeadine)

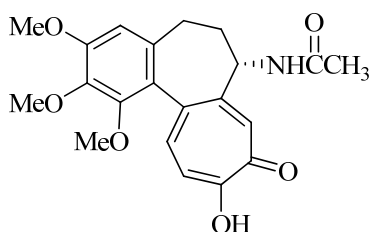
8.1.10. 苯乙基四氢异喹啉类 (Phenylethyltetrahydroisoquinolines)

8.1.10.1. 秋水仙碱类 (Colchicines)

官能性母体：秋水仙碱 (colchicine)



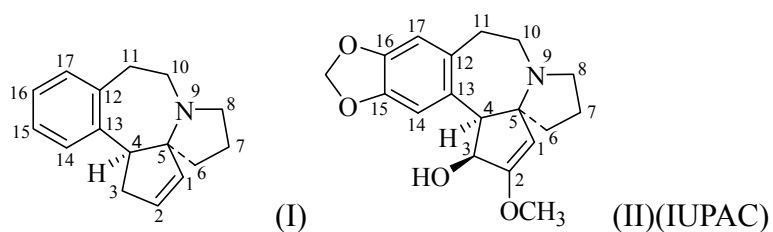
例：



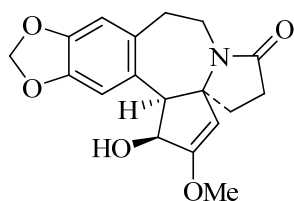
半系统名：10-*O*-脱甲基-秋水仙碱 (10-*O*-demethyl-colchicine)
俗名：去甲秋水仙碱 (colchifoleine)

8.1.10.2. 粗榧碱类 (Cephalotaxines)

母体氢化物：粗榧烷 (cephalotaxan) (I) 粗榧碱 (cephalotaxine) (II)(IUPAC)



例：



半系统名：2-甲氧基-15,16-甲叉二氧基-8-氧亚基-粗榧烷-3β-醇

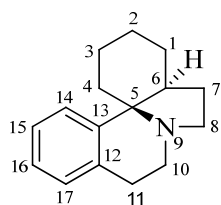
(2-methoxy-15,16-methylenedioxy-8-oxo-cephalotaxan-3β-ol) (按(I)命名)

8-氧亚基-粗榧碱 (8-oxo-cephalotaxine) (按(II)命名)

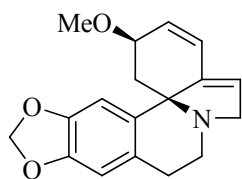
俗名：粗榧酰胺碱 (cephalotaxinamide)

8.1.10.3. 刺桐碱类 (Erythrines)

母体氢化物：刺桐烷 (erythrinan)



例：



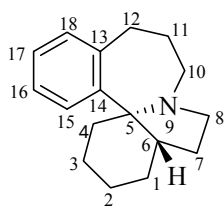
半系统名：3β-甲氧基-15,16-甲叉二氧基-刺桐烷-1,6-二烯

(3β-methoxy-15,16-methylenedioxy-erythrinan-1,6-diene)

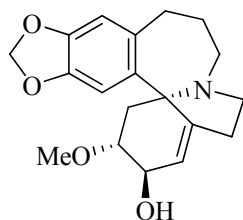
俗名：刺桐灵碱 (erythraline)

8.1.10.4. 高刺桐碱类 (Homoerythrines)

母体氢化物：高刺桐烷 (homoerythran)



例:

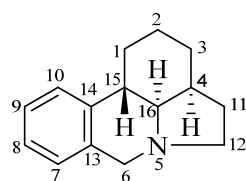


半系统名: 3 α -甲氧基-16,17-甲叉二氧基-高刺桐烷-1(6)-烯-2 β -醇
(3 α -methoxy-16,17-methylenedioxy-homoerythrinan-1(6)-en-2 β -ol)
俗名: 高刺桐碱 (homoerythratine)

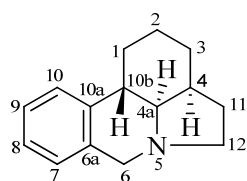
8.1.11. 苄基苯乙胺类 (Benzyphenylethylamines)

8.1.11.1. 石蒜碱类 (Lycorines)

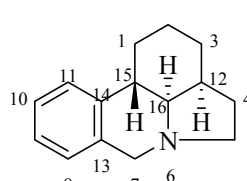
母体氢化物: 石蒜烷 (galanthan) 编号系统有(I) (II) (III)-(IUPAC)



(I)

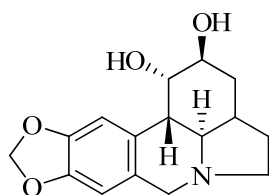


(II)



(III)-(IUPAC)

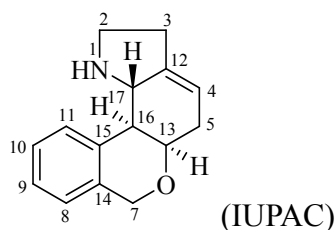
例:



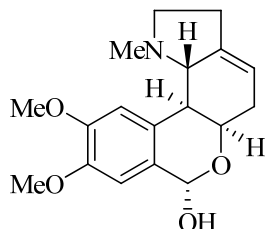
半系统名: 8,9-甲叉二氧基-石蒜烷-1 α ,2 β -二醇(8,9-methylenedioxy-galanthan-1 α ,2 β -diol)
(按编号系统(I))
俗名: 石蒜碱 (lycorine)

8.1.11.2. 石蒜伦碱类 (Lycorenines)

母体氢化物: 石蒜伦烷 (lycorenan)



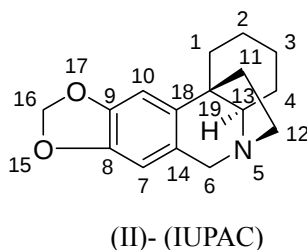
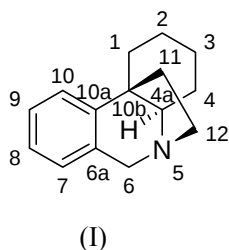
例:



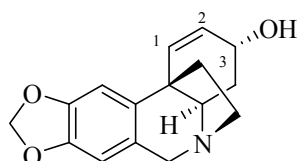
半系统名: 9,10-二甲氧基-1-甲基-石蒜伦烷-4(12)-烯-7 α -醇
 (9,10-dimethoxy-1-methyl-lycorenan-4(12)-ene-7 α -ol)
 俗名: 石蒜伦碱 (lycorenine)

8.1.11.3. 文殊兰碱类 (Crinines)

母体氢化物: 文殊兰烷 (crinan) 母体和编号系统有(I) 和 (II)-(IUPAC)

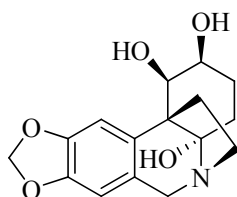


例:



半系统名: 8,9-甲叉二氧基-文殊兰烷-1 β , 2 β , 4 α -三醇 (按母体和编号系统(I))
 (8,9-methylenedioxy-1,2-didehydro-crinan-3 α -ol)
 文殊兰烷-1 β , 2 β , 4 α -三醇 (按母体和编号系统(II) -(IUPAC))
 (1,2-didehydro-crinan-3 α -ol)

俗名: 文殊兰碱(crine)



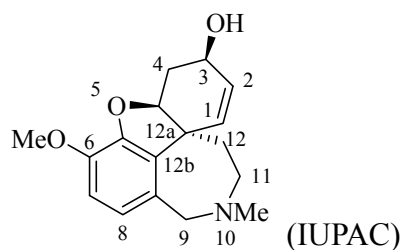
半系统名: 8,9-甲叉二氧基-文殊兰烷-1 β , 2 β , 4 α -三醇 (按母体和编号系统(I))

(8,9-methylenedioxy-crinan-1 β , 2 β , 4 α -triol)

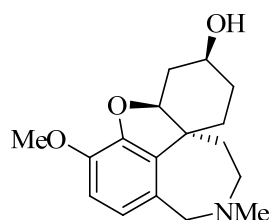
俗名：(crinamabine)

8.1.11.4. 加兰他敏类 (Galanthamines)

官能性母体：加兰他敏 (galanthamine)



例：

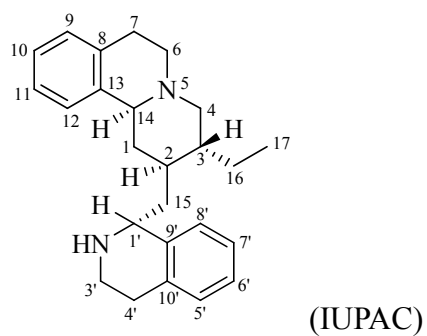


半系统名：1,2 -二氢加兰他敏 (1,2-dihydrogalanthamine)

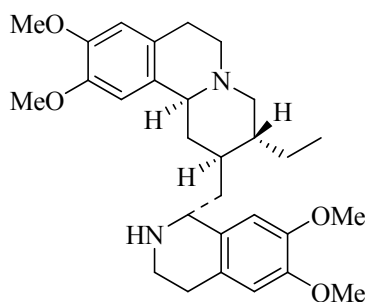
俗名：石蒜胺，石蒜明碱 (lycoramine)

8.1.12. 吐根碱类 (Emetines)

母体氢化物：吐根烷 (emetan)



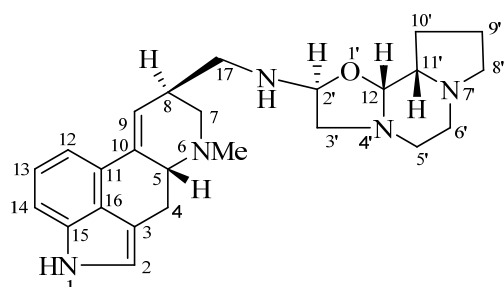
例：



半系统名：6',7',10,11-四甲氧基-吐根烷 (6',7',10,11-tetramethoxyemetan)
俗名：吐根碱 (emetine)

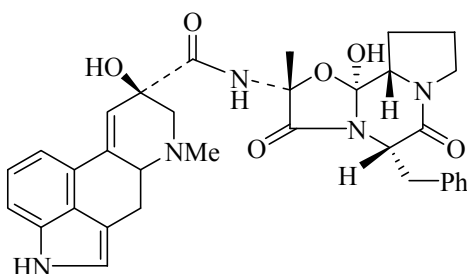
8.1.13. 半萜吲哚碱类(Semiterpenoid indoles) (麦角生物碱(Ergot alkaloids))

母体氢化物：麦角胺烷 (ergotaman)



(IUPAC)

例：



半系统名：5'-苄基-8 β ,12'-二羟基-2'-甲基麦角胺烷-18,3',6'-三酮
(5'-benzyl-8 β ,12'-dihydroxy-2'-methyl-ergotaman-18,3',6'-trione)
俗名：羟基麦角胺 (hydroxyergotamine)

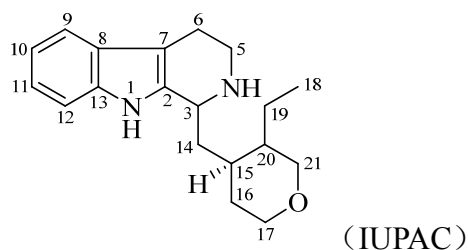
8.1.14. 单萜吲哚生物碱 (Monoterpenoid indole alkaloids)

自 1965 年 J. Le Men 和 W. I. Taylor (*Experientia*, **21**, 508-509)提出生源型的单萜吲哚生物碱的碳骨架编号后, 已被多数生物碱如柯南因碱类、育亨宾碱类等采用。但有些生物碱如白坚木碱类、士的宁碱类等, 则有如化学文摘 (CAS)、IUPAC 等和生源型两种编号命名。但是, 前者多见于早期文献, 而后者现已被多数学者 (参见: J. Buckingham, et al, *Dictionary of Alkaloids*, 2nd ed., 2010, pp. xxiii-xxxiii)采用。这里, 同时并列两种编

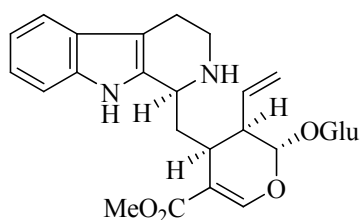
号, 分别用(生源)和(IUPAC)标注, 并优先推荐生源型编号命名。

8.1.14.1. 长春花生物碱类(文可生碱类)(Vincosines)

母体氢化物: 文可烷(vincosan)



例:

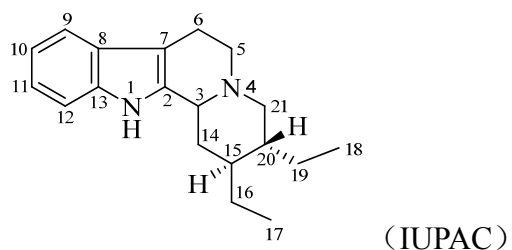


半系统名: 16,17,18,19-四脱氢-3 α , 20 α -文可烷-16-甲酸甲酯-21 α - β -D-葡萄糖苷
(16,17,18,19-tetrahydro-3 α , 20 α -vincosan-16-carboxylic acid methyl
ester-21 α - β -D-glucopyranoside)

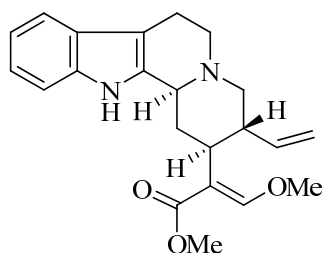
俗名: 异胡豆苣 (strictosidine)

8.1.14.2. 柯南因碱类(Corynantheines)

母体氢化物: 柯南烷(corynan)



例:



半系统名: (16E)-17-甲氧基-16,17,18,19-四脱氢-柯南烷-16-甲酸甲酯

或 (16E)-17-甲氧基-柯南-16,18-二烯-16-甲酸甲酯

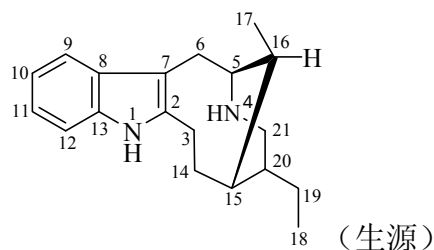
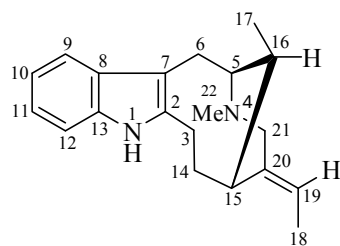
((16E)-17-methoxy-16,17,18,19-tetradehydro-corynan-16-carboxylic acid methyl ester)

or (17-methoxy-coryna-16,18-diene-16-carboxylic acid methyl ester)

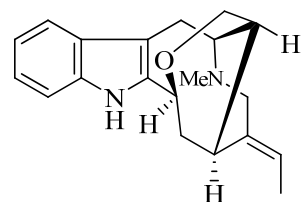
俗名: 柯南因碱 (corynantheine)

8.1.14.3. 老刺木碱类 (Vobasine alkaloids)

母体氢化物: 伏康烷 (vobasan)



例:

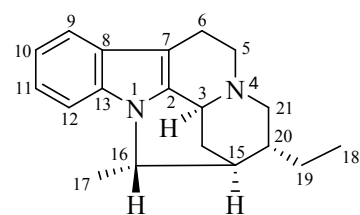


半系统名: 3β,17-氧桥-伏康烷 (3β,17-epoxy-vobasan) ——按 (IUPAC)

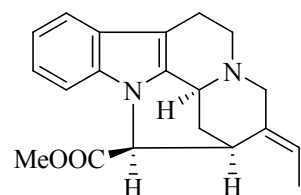
俗名: 狗牙花色奇碱, 九节木叶山马茶碱(taberpsychine)

8.1.14.4. 1, 16-环柯南烷类 (1, 16-Cyclocorynans)

母体氢化物: 1, 16-环柯南烷 (1, 16-cyclocorynan)



例:



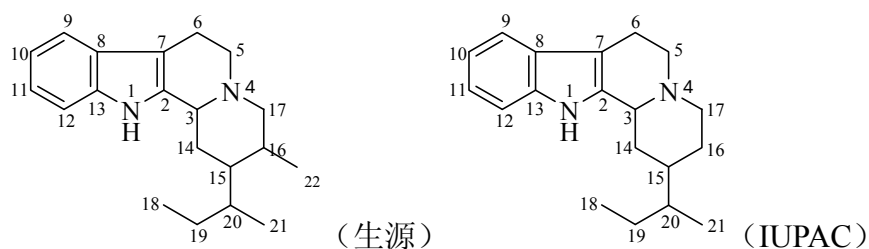
半系统名: 1,16-环柯南烷-19-烯-17-酸甲酯

(1, 16-cyclocorynan-19-en-17-oic acid methyl ester)

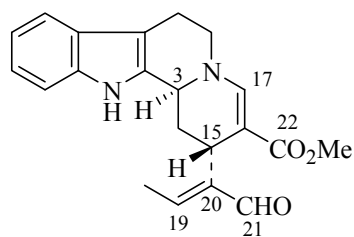
俗名: 多果树碱 (pleiocarpamine)

8.1.14.5. 瓦来西亚碱类 (Vallesiachotamines)

母体氢化物：瓦来西亚烷 (vallesiachotaman)



例：



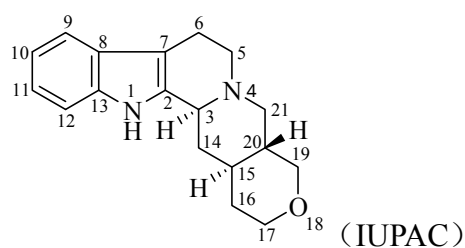
半系统名：(3R,15S,20E)-21-氧亚基-16,17,19, 20-四氢脱瓦来西亚烷-22-酸甲酯
(3R,15S,20E)-21-oxo-16,17,19, 20-tetrahydro-vallesiachotaman-22-oic acid methyl ester) ——按 (生源)

俗名：瓦来西亚胺(vallesiachotamine)

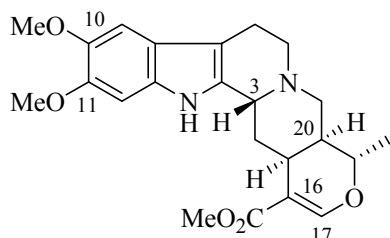
注：此类可按 (生源) 归入育亨烷，为 18,19-断育亨烷。

8.1.14.6. 氧杂育亨宾碱类 (Oxayohimbines)

母体氢化物：氧杂育亨烷 (oxayohimban)



例：

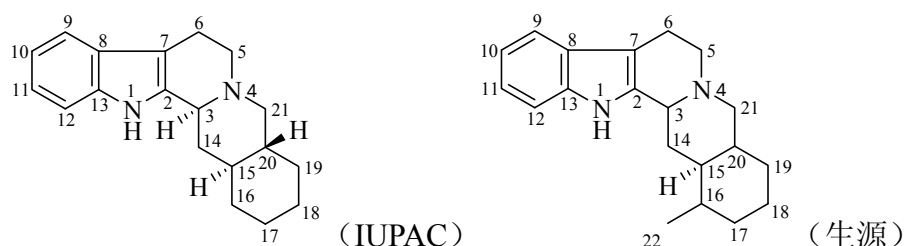


半系统名：10,11-二甲氧基-19 α -甲基-16,17-双脱氢-(3 β ,20 α)-氧杂育亨烷-16-甲酸甲酯
(10,11-dimethoxy-19 α -methy-16,17-didehydro-(3 β ,20 α)-oxayohimban-16-carboxylic acid methyl ester) ——按 (IUPAC)

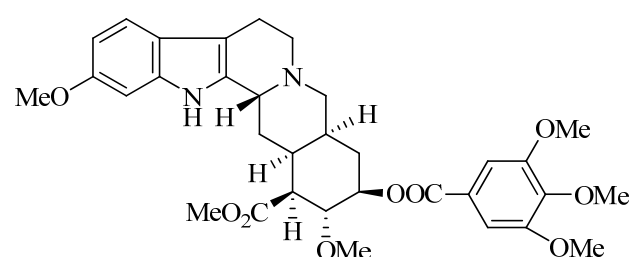
俗名：利血平灵 (reserpiline)

8.1.14.7. 育亨宾碱类 (Yohimbinoid alkaloids)

母体氢化物：育亨烷 (yohimban)



例：

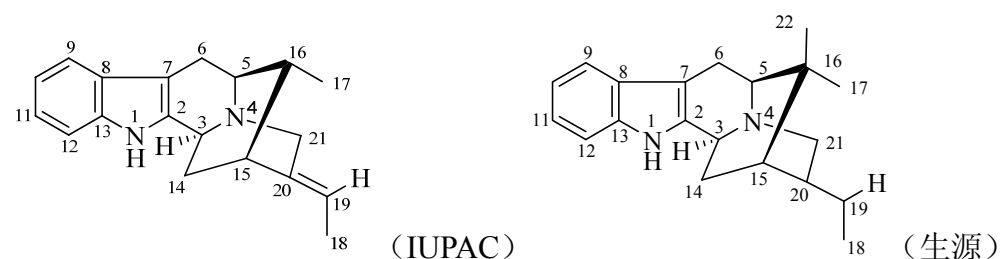


半系统名：11,17 α -二甲氧基-18 β -[(3,4,5-三甲氧基苯甲酰氧基)]-3 β , 20 α -育亨烷-16 β -甲酸甲酯(11,17 α -dimethoxy-18 β -[(3,4,5-tri-methoxy)-benzoyloxy]-3 β ,20 α -yohimban-16 β -carboxylic acid methyl ester) ——按 (IUPAC)

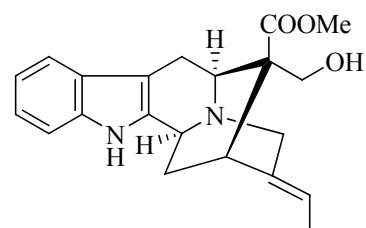
俗名：利血平 (reserpine)

8.1.14.8. 沙巴精碱类 (Sarpagines)

母体氢化物：沙巴精烷 (sarpagan)



例：

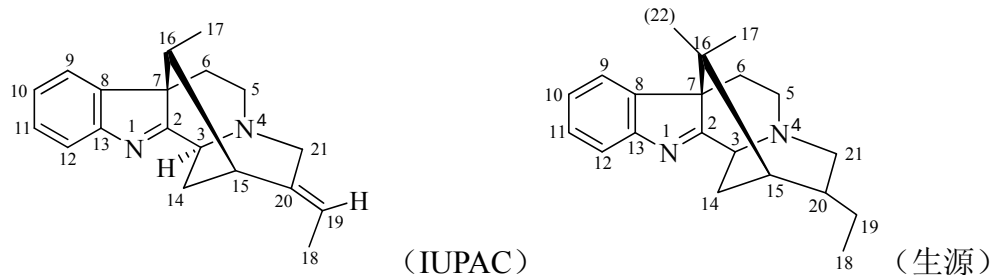


半系统名：(16S)-17-羟基-沙巴精烷-16-甲酸甲酯
((16S)-17-hydroxy-sarpagan-16-carboxylic acid methyl ester) ——按 (IUPAC)

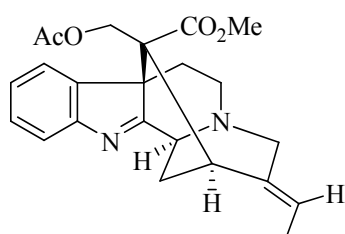
俗名：阿枯米定 (akuammidine)

8.1.14.9. 阿枯米林类 (Akuammilines)

母体氢化物：阿枯米烷 (akuammilan)



例：



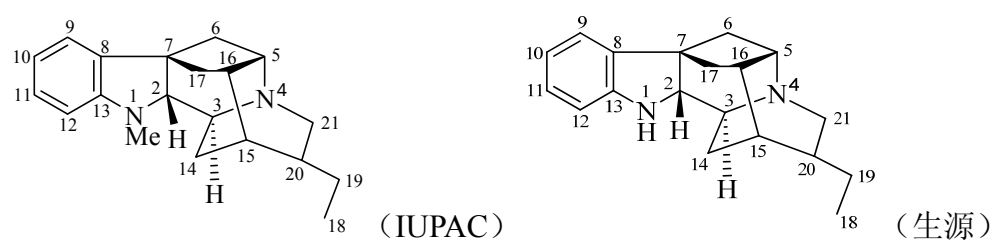
半系统名：(16R)-17-乙酰氧基-阿枯米烷-16-甲酸甲酯

((16R)-17-acetoxy-akuammilan-16-carboxylic acid methyl ester) ——按 (IUPAC)

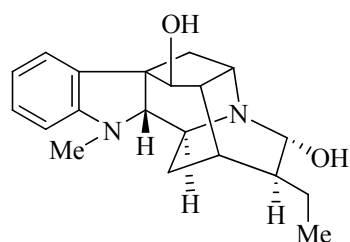
俗名：阿枯米林 (akuammiline)

8.1.14.10. 阿马林类 (萝芙木碱类) (Ajmalines)

母体氢化物：阿马林烷 (萝芙木烷) (ajmalan)



例：



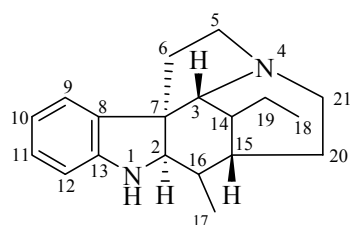
半系统名：(17R,21R)-1-甲基-阿马林烷-17, 21-二醇((17R,21R)-1-methyl-ajmalan-17, 21-diol) ——按 (生源)

((17R,21R)-阿马林烷-17, 21-二醇 ((17R,21R)-ajmalan-17,21-diol) ——按 (IUPAC)

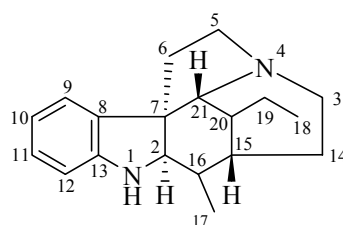
俗名：萝芙木碱 (rauwolfine)，阿马林 (ajmaline)

8.1.14.11. 康狄卡品碱类 (Condylcarpan alkaloids)

母体氢化物：康狄烷 (Condylfolane, Condylcarpan)



(IUPAC-ACS—注)

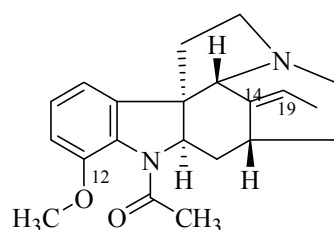


(生源—生物碱

辞典)

注：原文献中 Condylfolane 结构中无 17-甲基，现据生物碱辞典加入。

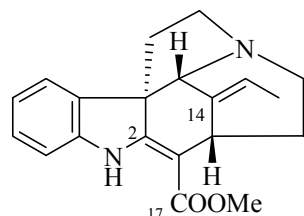
例：



半系统名：(14E)-1-乙酰基-12-甲氧基-17-脱甲基康狄-14(19)-烯

((14E)-1-acetyl-12-methoxy-17-nor-condylfol-14(19)-ene)

俗名：白坚木亭(aspidospermatine)



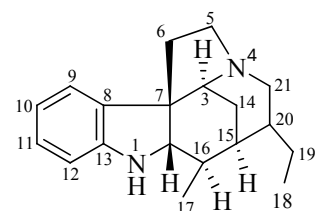
半系统名：(14E)-康狄-2(16),14(19)-二烯-17-酸甲酯

((14E)-condylfol-2(16),14(19)-dien-17-oic acid methyl ester)

俗名：康狄卡品 ((+)-condylcarpine)

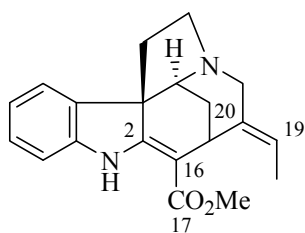
8.1.14.12. 阿枯米辛碱类 (Akuammicines)

母体氢化物：考尔烷 (curan)



(IUPAC)

例:

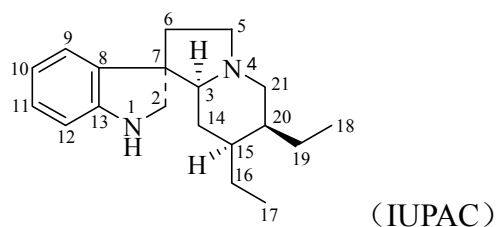


半系统名: 考尔-2(16),19-二烯-17-酸甲酯 (curan-2(16),19-dien-17-oic acid methyl ester)

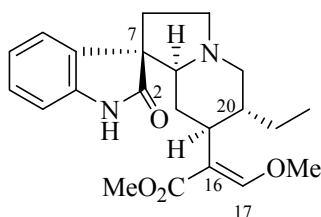
俗名: 阿枯米辛 (akuammicine)

8.1.14.13. 钩藤碱类 (Rhynchophyllines)

母体氢化物: 柯诺塞烷 (corynoxan)



例:



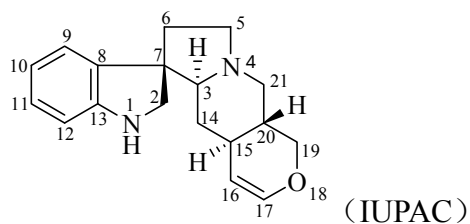
半系统名: (7*R*,16*E*)-17-甲氧基-2-氧亚基-柯诺塞-16-烯-16-甲酸甲酯

((7*R*,16*E*)-17-methoxy-2-oxo-20β*H*-corynox-16-ene-16-carboxylic acid methyl ester)

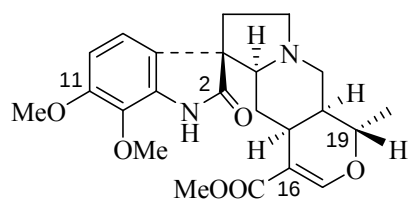
俗名: 钩藤碱 (rhynchophylline)

8.1.14.14. 台湾钩藤碱类 (Formosanines)

母体氢化物: 台湾钩藤烷 (formosanan)



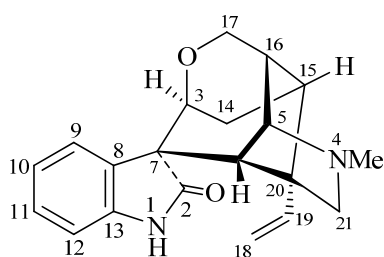
例:



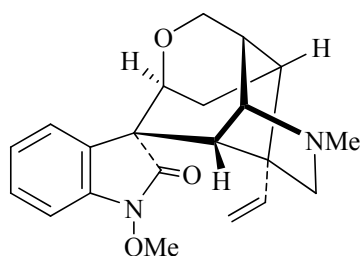
半系统名：11,12-二甲氧基-19 α -甲基-2-氧亚基-(20 α)-台湾钩藤烷-16-甲酸甲酯
 (11,12-dimethoxy-19 α -methyl-2-oxo-(20 α)-formosanane-16-carboxylic acid methyl ester)
 俗名：蔓长春丁 (majdine, carapanaubine)

8.1.14.15. 钩吻碱类 (Gelsemium alkaloids)

官能性母体：钩吻碱 (gelsemine)



例：

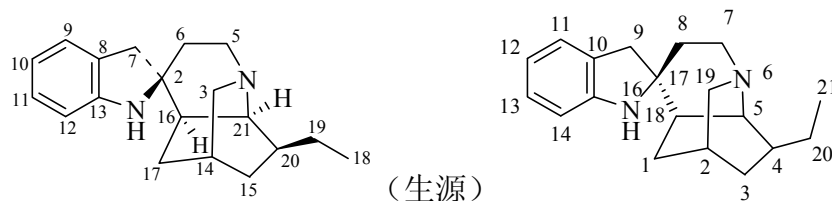


半系统名：1-甲氧基-钩吻碱 (1-methoxy-gelsemine)

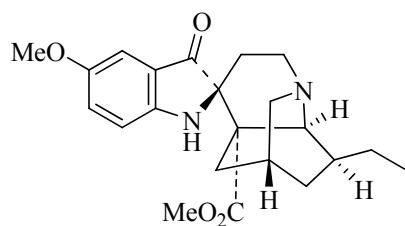
俗名：钩吻绿碱 (gelsevirine)

8.1.14.16. 伊波鲁顿碱类 (Iboluteines)

官能性母体：伊波鲁顿烷 (ibolutein) —按 (生源)；9H,17H-8(9→17)迁-依波加明
 (9H,17H-8(9→17)abeo-ibogamine) —按 (IUPAC)



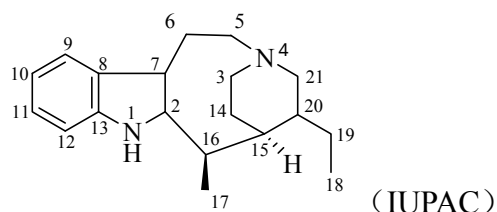
例：



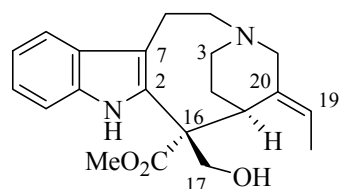
半系统名：7-氧亚基-10-甲氧基-伊波鲁顿烷-16 α -甲酸甲酯
 (7-oxo-10-methoxy-ibolutein-16 α -carboxylic acid methyl ester) 一按（生源）
 (17*S*)-12-甲氧基-9-氧亚基-9*H*,17*H*-8(9 $\rightarrow$ 17)迁-依波加明-18 α -甲酸甲酯
 ((17*S*)-12-methoxy-9-oxo-9*H*,17*H*-8(9 $\rightarrow$ 17)abeo-ibogamine-18 α -carboxylic acid methyl ester) 一按（IUPAC）
 俗名：沃台因(voaluteine)

8.1.14.17. 花冠木碱类 (Stemmadenines)

母体氢化物：花冠木烷 (stemmadenan) 或 3,7-断-考尔烷(3,7-seco-curan)



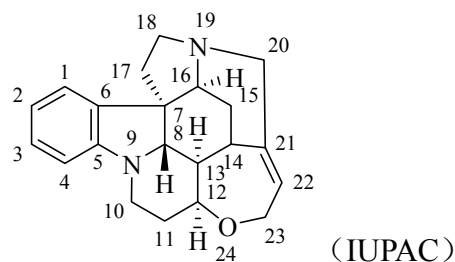
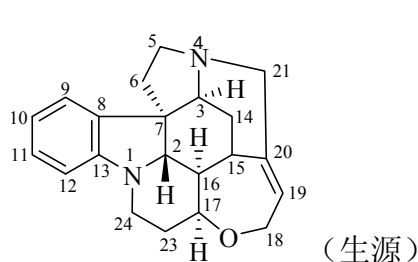
例：



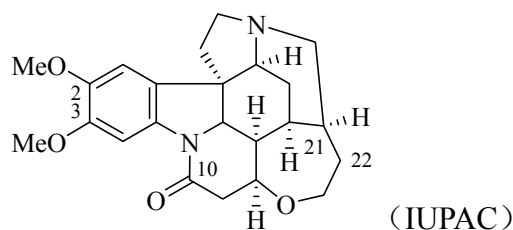
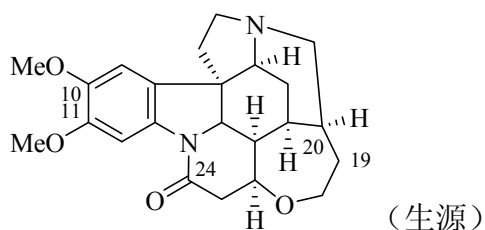
半系统名：17-羟基-羟基-花冠木-2(7),19-二烯-16-甲酸甲酯
 (17-hydroxy-stemmadenan -2(7),19-diene-16-carboxylic acid methyl ester)
 或 17-羟基-3,7-断-考尔-2(7),19-二烯-16-甲酸甲酯
 (17-hydroxy-3,7-seco-cura-2(7),19-diene-16-carboxylic acid methyl ester)
 俗名：花冠木碱 (stemmadenine)

8.1.14.18. 士的宁碱类或番木鳖碱类 (Strychnines)

母体氢化物：士的宁烷 或 番木鳖烷 (strychnidine)



例:



半系统名: 10,11-二甲氧基-19,20-二氢-士的宁烷-24-酮

(10,11-dimethoxy-19,20-dihydro-strychnidin-24-one)——按(生源)

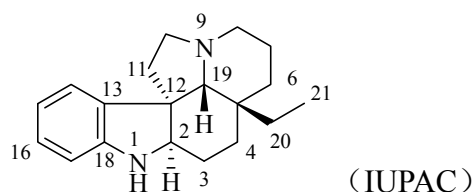
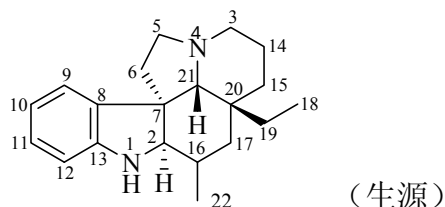
或 2,3-二甲氧基-21,22-二氢-番木鳖-10-酮

(2,3-dimethoxy-21,22-dihydro-strychnidin-10-one) ——按(IUPAC)

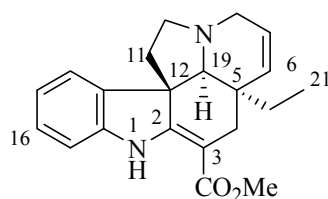
俗名: 马钱子碱 (brucine)

8.1.14.19. 白坚木碱类 (Aspidospermines)

母体氢化物: 白坚木(定)烷 (aspidospermidine)



例:



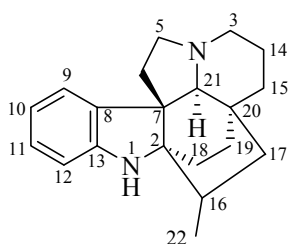
半系统名: *ent*-2,3,6,7-四脱氢-白坚木(定)烷-3-甲酸甲酯

(*ent*-2,3,6,7-tetrahydro-aspidospermidine-3-carboxylic acid methyl ester) ——按(IUPAC)

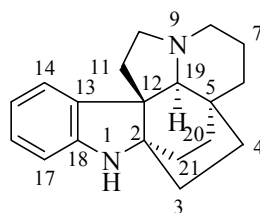
俗名: 柳叶水甘草碱 ((-)-tabersonine)

8.1.14.20. 白坚木替宁碱类 (Aspidofractinines)

母体氢化物: 白坚木替宁 (aspidofractinine)

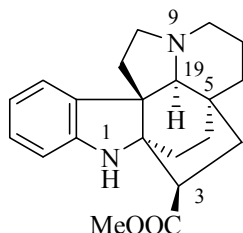


(生源)



(IUPAC)

例:



半系统名: (16R)-白坚木替宁-22-酸甲酯 ((16R)-aspidofractinin-22-oic acid methyl ester) —按 (生源)

(2R)-白坚木替宁-3β-甲酸甲酯 ((2R)-aspidofractinine-3β-carboxylic acid methyl ester) —按 (IUPAC)

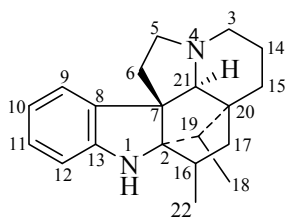
俗名: 柯蒲木宁碱 (kopsinine)

8.1.14.21. 文朵灵宁碱类 (Vindolinines) —按 (生源)

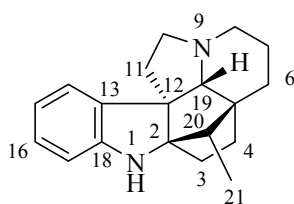
环白坚木碱类 (Cycloaspidospermidines) —按 (IUPAC)

母体氢化物: 文朵灵烷 (vindolinan) —按 (生源)

2,20-环白坚木(定)烷 (2,20-cycloaspidospermidine) —按 (IUPAC)

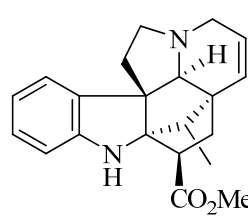


(生源)

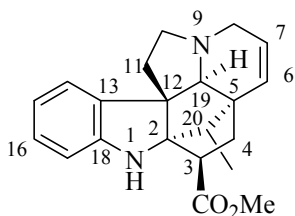


(IUPAC)

例:



(生源)



(IUPAC)

半系统名: 文朵灵-14(15)-烯-22-酸甲酯 (16α-vindolin-14(15)-en-22-oic acid methyl ester) —按 (生源)

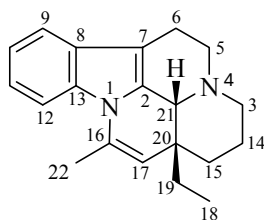
6,7-双脱氢-2,20-环白坚木(定)烷-3β-甲酸甲酯

(6,7-didehydro-2,20-cyclo-aspidospermidine-3 β -carboxylic acid methyl ester) —按 (IUPAC)

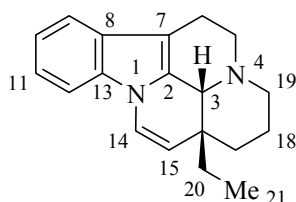
俗名：文噪灵宁碱，文噪宁碱，长春尼宁 ((-)-vindolinine)

8.1.14.22. 伊波南生物碱类 (Eburnas)

母体氢化物：伊波南宁碱 (eburnamenine)

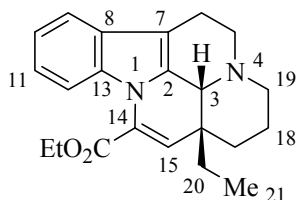


(生源)



(IUPAC)

例：



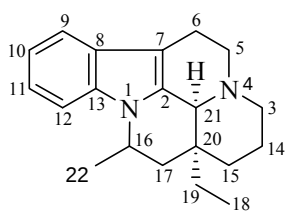
半系统名：伊波南宁碱-14-甲酸乙酯 (eburnamenine-14-carboxylic acid ethyl ester) —按 (IUPAC)

伊波南宁碱-22-酸乙酯 (eburnamenine-22-oic acid ethyl ester) —按 (生源)

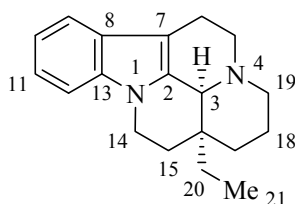
俗名：维朴生碱 (vinpocetine)

8.1.14.23. 文卡明碱类 (Vincamines)

母体氢化物：文卡烷 (vincane) (伊波南烷骨架(eburnamenine)的对映体)

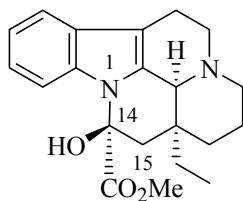


(生源)



(IUPAC)

例：



半系统名：14 β -羟基文卡烷-14 α -甲酸甲酯 (14 β -hydroxyvincane-14 α -carboxylic acid methyl ester) —按 (IUPAC)

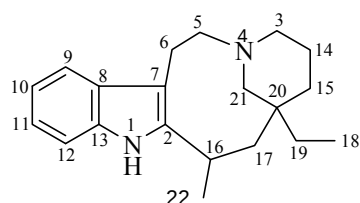
16 β -羟基-文卡烷-22-酸甲酯 (16 β -hydroxy-vincane-22-oic acid methyl ester) —按 (生源)

俗名：长春胺 (vincamine)

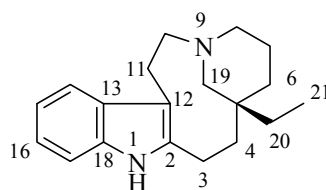
8.1.14.24. 白雀胺碱类 (Quebrachamines)

母体氢化物：白雀胺烷 (quebrachaman) 或 2,12-二脱氢-12,19-断-白坚木(定)烷

(12,19-seco-aspidospermidine) — 按 (IUPAC)

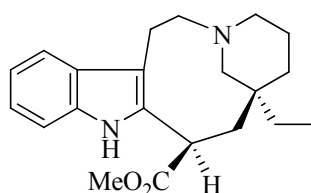


(生源)



(IUPAC)

例：



半系统名：(16R,20S)-白雀胺烷-22-酸甲酯 ((16R,20S)-quebrachaman-22-oic acid methyl ester) — 按 (生源)

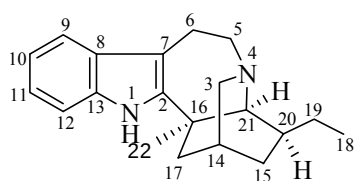
(3R,5S)-2,12-二脱氢-12,19-断-白坚木(定)烷-3-甲酸甲酯

((3R,5S)-2,12-didehydro-12,19-seco-aspidospermidine-3-carboxylic acid methyl ester) — 按 (IUPAC)

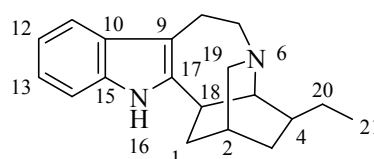
俗名：(+)-文卡啶碱 ((+)-vincadine)

8.3.14.25. 伊波加明碱类 (Ibogamines)

母体氢化物：伊波加明 (ibogamine)

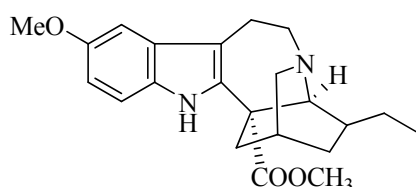


(生源)



(IUPAC)

例：



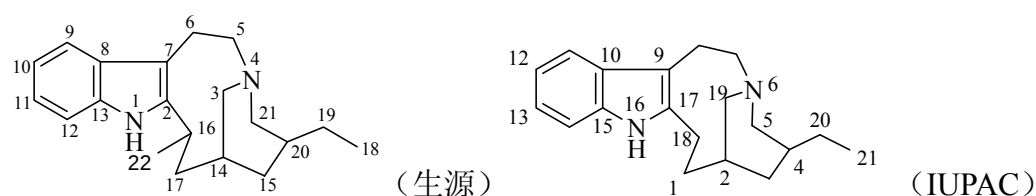
半系统名：10-甲氧基-伊波加明-22-酸甲酯 (10-methoxy-ibogamine-22-oic acid methyl ester) — 按 (生源)

12-甲氧基-依波加明-18 α -甲酸甲酯 (12-methoxy-ibogamine-18 α -carboxylic acid methyl ester) — 按 (IUPAC)

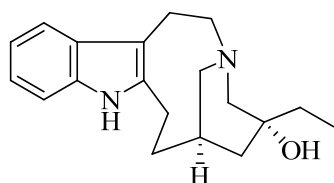
俗名：老刺木碱 (voacangine)

8.1.14.26. 克里瓦明碱类 (Cleavamines)

母体氢化物：克里瓦明 (cleavamine) 或 5,18-断-依波加明 (5,18-seco-ibogamine) 按 (IUPAC)



例：



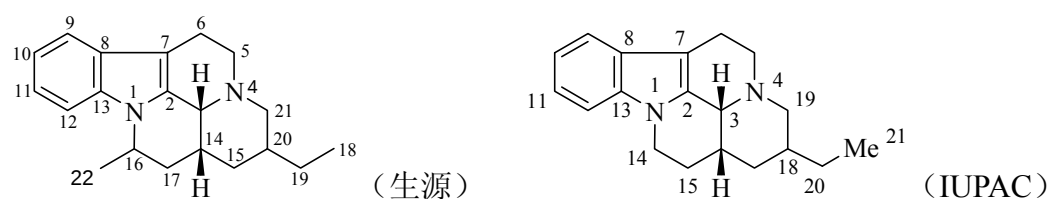
半系统名：(14S,20R)-22-脱甲基-克里瓦明-20R-醇((14S,20R)-22-nor-cleavamine-20-ol) — 按 (生源)

5,18-断-依波加明-4 α -醇 (5,18-seco-ibogamin-4 α -ol) — 按 (IUPAC)

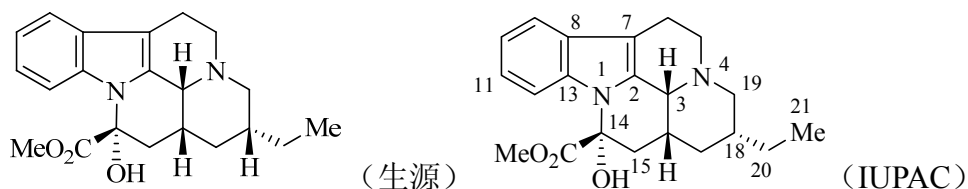
俗名：维尔巴纳明 (velbanamine)

8.1.14.27. 塔卡明碱类 (Tacamines)

母体氢化物：塔卡烷 (tacaman)



例：



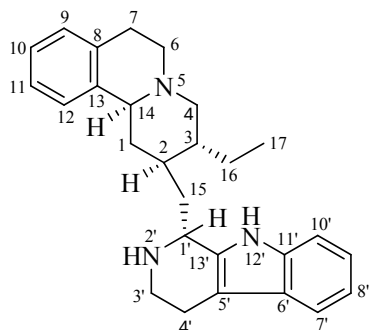
半系统名：(20R)-16 α -羟基-塔卡烷-22-酸甲酯((20R)-16 α -hydroxy-tacaman-22-oic methyl ester) — 按 (生源)

18R-14 α -羟基-塔卡烷-14 β -甲酸甲酯 (18R-14 α -hydroxy-tacaman-14 β -carboxylic methyl ester) — 按 (IUPAC)

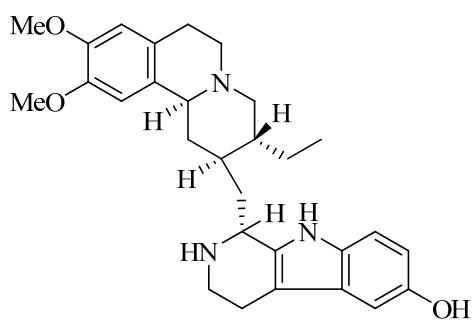
俗名：塔卡明碱 (tacamine)

8.1.14.28. 土布洛生碱类 (Tubulosines)

母体氢化物：土布洛生烷 (tubulosan)



例：

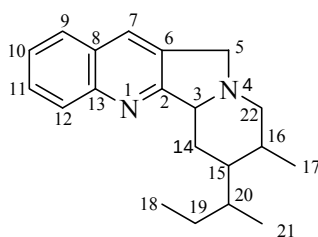


半系统名：10,11-二甲氧基-土布洛生烷-8'-醇 (10,11-dimethoxy-tubulosan-8'-ol)

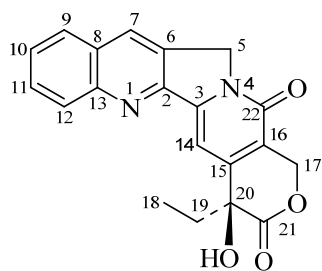
俗名：土布洛生 (tubulosine)

8.1.14.29. 喜树碱类 (Camptotecines)

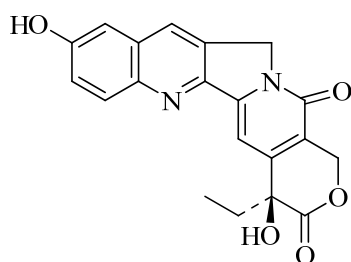
母体氢化物：喜树烷 (camptothecin)



官能性母体：喜树碱 (camptothecine)



例:



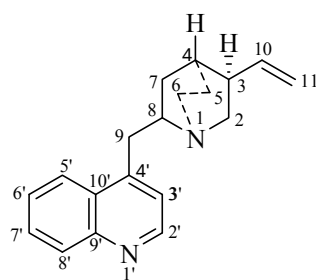
半系统名: 10-羟基-喜树碱 (10-hydroxy-camptothecine)

俗名: 羟基喜树碱 (hydroxycamptothecine)

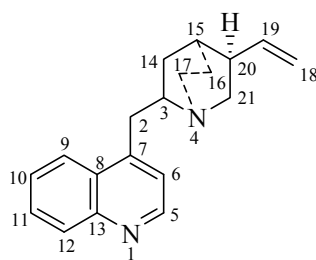
8.1.14.30. 奎宁碱类 (Cinchonines)

母体氢化物: 奎宁烷 (cinchonan)

本类有 Rabe 法 (IUPAC) 和 Le Men / Taylor 法两种编号。前者广泛用于化学和药学, 而后者常见于植化。这里, 采用两种编号命名。

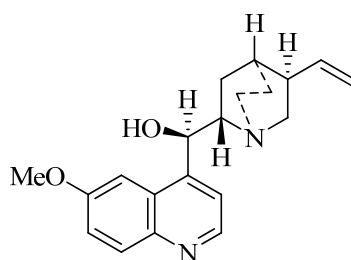


(IUPAC)



(生源—Le Men / Taylor)

例:



半系统名: (8R, 9S)-6'-甲氧基-奎宁烷-9-醇 ((8R, 9S)-6'-methoxy-cinchonan-9-ol) —按 (IUPAC)

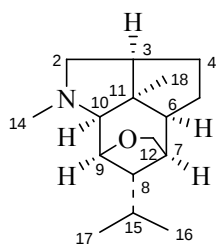
(2S,3R)-10-甲氧基-奎宁烷-2-醇 ((2S,3R)-10-methoxy-cinchonan-2-ol) —按(生源)

俗名: 奎宁碱 (quinine)

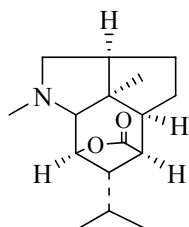
8.1.15. 倍半萜生物碱 (Sesquiterpenoid alkaloids)

8.1.15.1. 石斛碱类 (Dendrobines)

母体氢化物: 石斛烷 (dendrobane)



例：



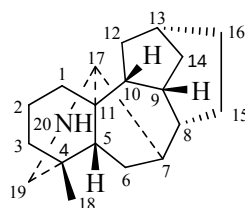
半系统名：石斛烷-12-酮 (dendroban-12-one)

俗名：石斛碱 (dendrobine)

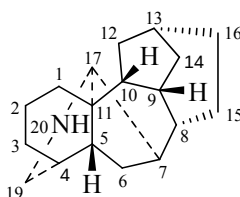
8.1.16. 二萜生物碱 (Diterpenoid alkaloids)

8.1.16.1. 乌头碱类 (Aconitines)

母体氢化物：乌头烷 (aconitane)

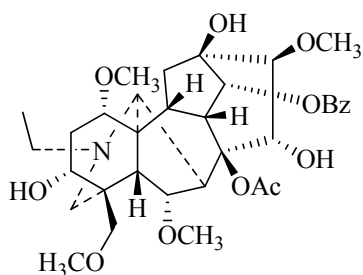


(生源—生物碱辞典)



(ACS)

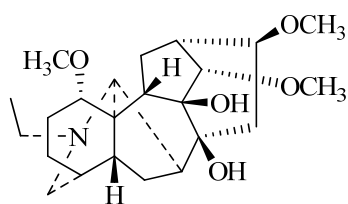
例：



半系统名： N -乙基-8 β -乙酰氧基-14 α -苯甲酰氧基-1 α , 6 α , 16 β , 18-四甲氧基-乌头烷-3 α , 13 β , 15 α -三醇

(N -ethyl-8 β -acetoxy-14 α -benzoxy-1 α , 6 α , 16 β , 18-tetramethoxy-aconitane-3 α , 13 β , 15 α -triol)

俗名：乌头碱 (Aconitine)



半系统名：1 α , 14 α , 16 β -三甲氧基-去甲乌头烷-8 β , 9 β -二醇 (1 α , 14 α , 16 β -trimethoxy-noraconitae-8 β , 9 β -diol)——按（生源）

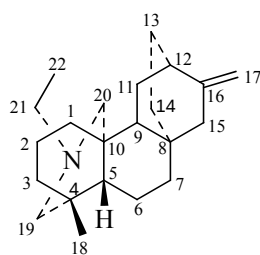
1 α , 14 α , 16 β -三甲氧基-乌头烷-8 β , 9 β -二醇 (1 α , 14 α , 16 β -trimethoxy-aconitane-8 β , 9 β -diol)——按（ACS）

俗名：高乌碱 (lappaconine)

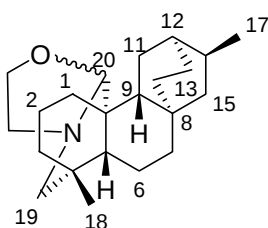
8.1.16.2. 阿替生类 (Atisines)

阿替生类的母体氢化物文献上有三种，现分列如下：

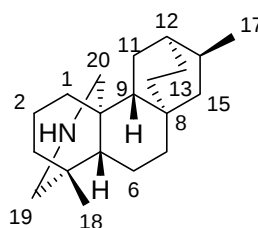
母体氢化物：(I) 阿替生烷 (atisan)；(II) 阿替生烷(atisinane)；(III) 阿替烷(atidane)——(IUPAC)



(I)

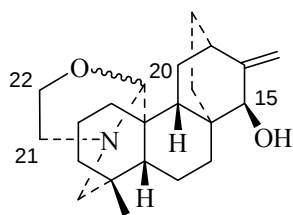


(II)



(III) (IUPAC)

例：



半系统名：20,22-环氧-阿替生烷-15 β -醇 (20, 22-epoxy-atisan-15 β -ol)——按（I）

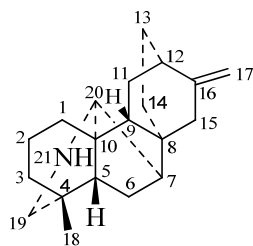
阿替生-16-烯-15 β -醇 (atisin-16-en-15 β -ol)——按（II）

(20 ξ)-20,21- (氧乙叉基)阿替-16-烯-15 β -醇((20 ξ)-20,21-(epoxyethano)atid-16-en-15 β -ol)——按（III）(IUPAC)

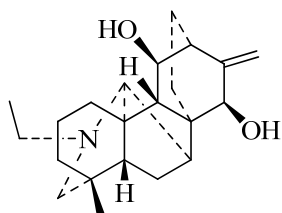
俗名：阿替生 (atisine)

8.1.16.3. 光翠雀碱类 (Denudatines)

母体氢化物：光翠雀烷 (denudatan)



例:

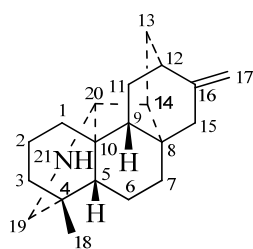


半系统名: *N*-乙基-光翠雀烷-11 β ,15 β -二醇(*N*-ethyl-denudatan-11 β , 15 β -diol)

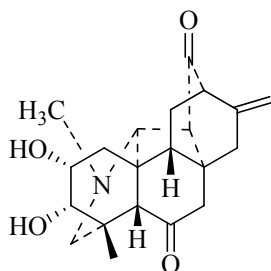
俗名: 光翠雀碱 (denudatine)

8.1.16.4. 海替定类 (Hetidines)

母体氢化物: 海替烷 (hetidan) 或 6,21-断-海替生烷 (6,21-secohetisane)



例:



半系统名: 2 α , 3 α -二羟基-*N*-甲基-海替烷-6, 13-二酮

(2 α , 3 α -dihydroxy-*N*- methyl-hetidane-6,13-dione)

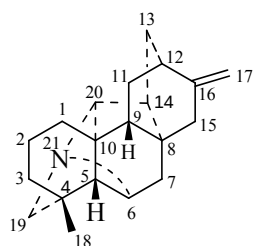
或 二羟基-*N*-甲基-6,21-断-海替生烷-6, 13-二酮

(2 α , 3 α -dihydroxy-*N*- methyl-6,21-secohetisane-6,13-dione)

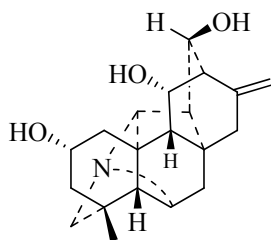
俗名: 海替定 (hetidine)

8.1.16.5. 海替生类 (Hetisines)

母体氢化物：海替生烷 (hetisan)



例：

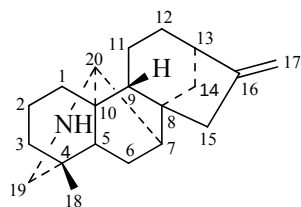


半系统名：海替生烷-2 α , 11 α , 13 β -三醇 (hetisan-2 α , 11 α , 13 β -triol)

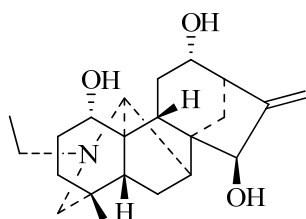
俗名：海替生 (hetisine)

8.1.16.6. 欧乌头碱类 (Napellines)

母体氢化物：欧乌头烷 (napellan)

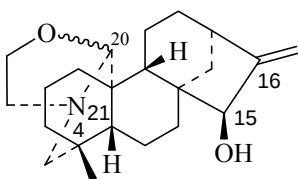


例：



半系统名：N-乙基-欧乌头烷-1 α , 12 α , 15 β -三醇 (N-ethyl-napellan-1 α , 12 α , 15 β -triol)

俗名：欧乌头碱 (napelline, luciculine)

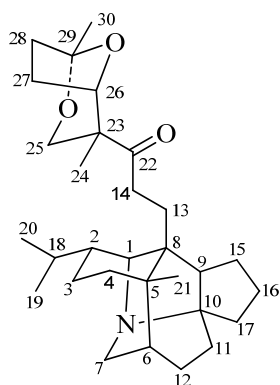


半系统名: (20 ξ)-20,21- (氧乙叉基)欧乌头烷-15 β -醇
 ((20 ξ)-20,21-(epoxyethano)napellan-15 β -ol)
 或: (20 ξ)-二氢-噁唑并[2',3':20,21]欧乌头烷-15 β -醇
 ((20 ξ)-dihydro-oxazolo[2',3':20,21]napellan-15 β -ol)
 俗名: 维特钦 ((15 β)-veatchine)

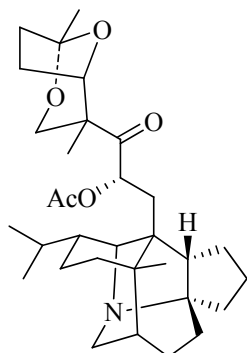
8.1.17. 三萜生物碱(Triterpenoid alkaloids) 或虎皮楠生物碱(*Daphniphyllum* alkaloids)

8.1.17.1. 虎皮楠碱类 (Daphniphyllines)

母体氢化物: 共虎皮楠碱 (codaphniphylline)



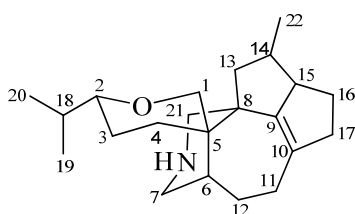
例:



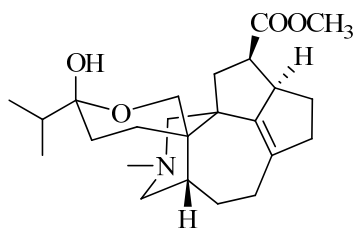
半系统名: 14*S*-乙酰氧基-柯虎皮楠碱
 [(14*S*)-acetoxy-codaphniphylline]
 俗名: 虎皮楠碱, 交让木碱(daphniphylline)

8.1.17.2. 育瑞利碱类 (Yuzurines)

母体氢化物: 育瑞烷 (yuzuran)



例:



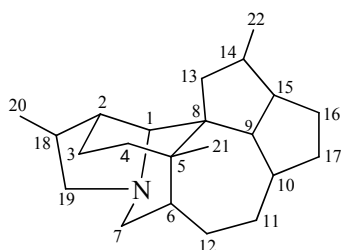
半系统名: 2β-羟基- N-甲基-育瑞烷-22-酸甲酯

(2β-hydroxy- N-methyl- yururan-22-oic acid methyl ester)

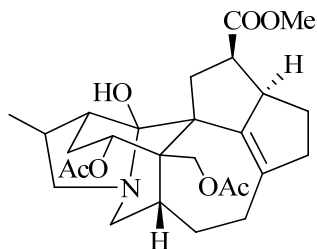
俗名: 纤细虎皮楠碱, 达夫尼生 (daphnigracine)

8.1.17.3. 育瑞利明碱类 (Yuzurimines)

母体氢化物: 育瑞利烷 (yuzuriman)



例:



半系统名: 4α, 21-二乙酰氧基-1-羟基-育瑞利烷-22-酸甲酯

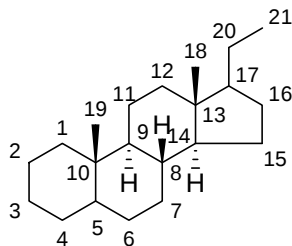
(4α, 21-diacetoxy-1-hydroxy-yururiman-22-oic acid methyl ester)

俗名: 育瑞利明碱 (yuzurimine)

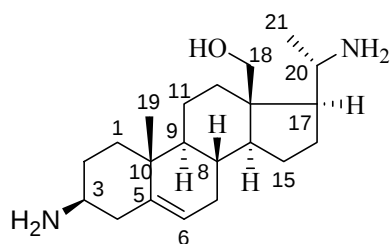
8.1.18. 甾体生物碱 (Steroidal alkaloids)

8.1.18.1. 孕甾烷胺类 (Pregnan-amines)

母体氢化物: 孕甾烷 (pregnane)



例:

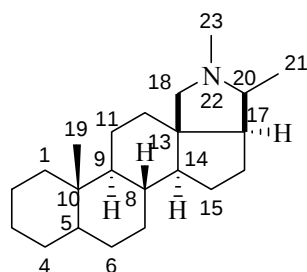


半系统名: 3β,20S-二氨基-孕甾-5-烯-18-醇 (3β,20S-diamino-pregnan-5-en-18-ol)

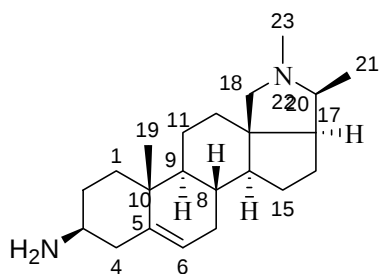
俗名: 止泻木明 (holarrhimine)

8.1.18.2. 地麻素类甾体生物碱 (Conanine alkaloids)

母体氢化物: 地麻素烷 (conanine)



例:

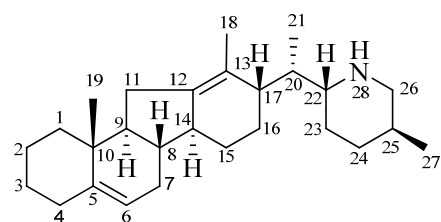


半系统名: 地麻素-5-烯-3β-胺 (con-5-en-3-amine)

俗名: 锥丝胺 (conamine)

8.1.18.3. 藜芦碱类 (Veratramines)

母体氢化物: 藜芦烷 (veratraman)

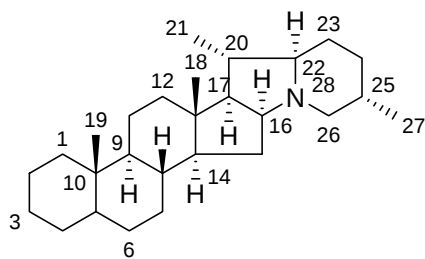


(IUPAC)

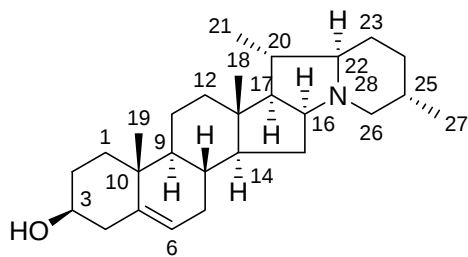
Chemical structure of 14-methyl-14,15-dihydronaphthalene-1,14-diol. The structure shows a naphthalene core with a methyl group at position 14 and hydroxyl groups at positions 1 and 14. The numbering 3, 14, 15, 17, and 23 is shown at various positions.

(14, 15, 16, 17-tetradehydro-veratraman-3 β , 23 β -diol)

45

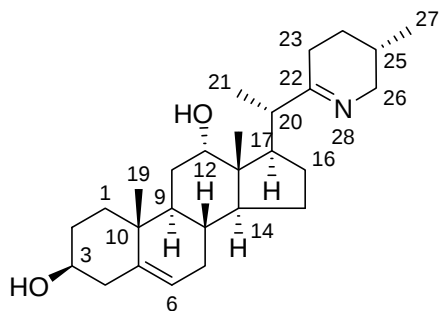


例:



半系统名: 茄甬-5-烯-3 β -醇 (solanid-5-en-3 β -ol)

俗名: 茄啉 (solanidine)

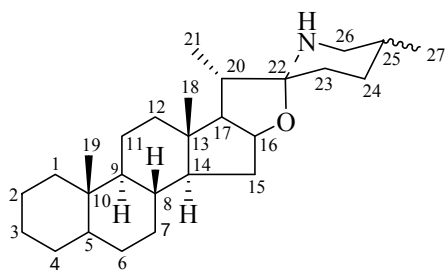


半系统名: (3 β ,12 α)-16,28-断茄甬-5,22(28)-二烯-3,12-二醇
((3 β ,12 α)-16,28-secosolanid-5,22(28)-dien-3,12-diol)

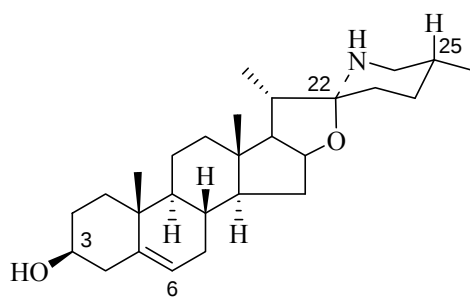
俗名: 大理藜芦甬体碱 (vermitaline)

8.1.18.6. 螺茄碱类 (Spirosolanidines)

母体氢化物: 螺茄烷 (spirosolane)



例:

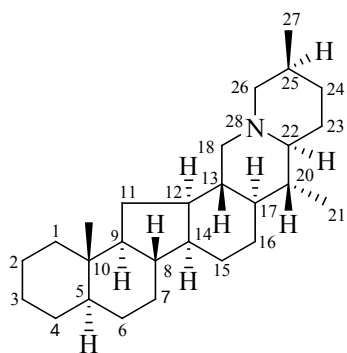


半系统名: (3 β ,22*R*,25*R*)-螺茄-5-烯-3-醇 (3 β ,22*R*,25*R*-spirosol-5-en-3-ol)

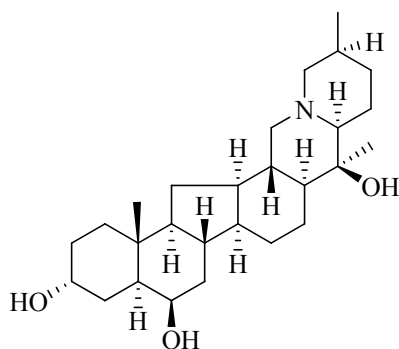
俗名: 澳洲茄胺 (solasodine, solancarpidine)

8.1.18.7. 西藜芦碱类 (Cevanines)

母体氢化物: 西藜芦烷(cevane)



例:

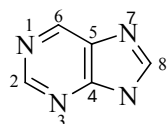


半系统名: 5 α -西藜芦烷-3 β , 6 β , 20 β -三醇 (5 α -cevan-3 β , 6 β , 20 β -triol)

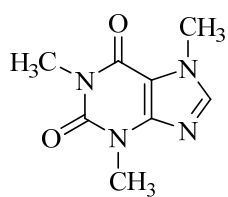
俗名: 浙贝甲素 (verticine)

8.1.19. 嘌呤类 (Purines)

母体氢化物: 嘌呤 (purine)



例：



半系统名：1,3,7-三甲基-1*H*-嘌呤-2,6-二酮(1,3,7-trimethyl-1*H*-purine-2,6-dione)

俗名：咖啡因 (caffeine)

生物碱分类目录

8.1. 生物碱 (Alkaloid)

8.1.1. 吡咯烷类(Pyrrolidines)

8.1.1.1. 吡咯烷类 (Pyrrolidines)

8.1.1.2. 金刚大碱类 (Croomines)

8.1.1.3. 百部新碱类 (Stemoninines)

8.1.1.4. 原百部碱类 (Protostemonines)

8.1.2. 莨菪碱类(Tropane alkaloids)

8.1.3. 六氢吡咯嗪类（吡咯里西啶类）(Pyrrolizidines)

8.1.3.1. 六氢吡咯嗪类（吡咯里西啶类）(Pyrrolizidines)

8.1.3.2. 千里光烷类 (senecionan)

8.1.4. 哌啶类 (Piperidines)

8.1.5. 八氢吲哚嗪[类]生物碱（吲哚里西啶类）(Indolizidines)

8.1.5.1. 八氢吲哚嗪类（octahydroindolizines）吲哚里西啶类 (indolizidine)

8.1.5.2. 菲并吲哚嗪[类]生物碱（菲并吲哚里西啶类）(Phenanthroindolizidines)

8.1.5.3. 一叶萩碱类 (Securines)

8.1.6. 八氢喹啉[类]生物碱（喹诺里西啶类）(Quinolizidines)

8.1.6.1. 八氢喹啉[类]生物碱（octahydroquinolizines）

8.1.6.2. 金雀花碱类 (Cytosines)

8.1.6.3. 鹰爪豆碱类 (Sparteines)

8.1.6.4. 苦豆碱类 (Aloperines)

8.1.6.5. 苦参碱类 (Matrines)

8.1.6.6. 石松碱类 (Lycopodines)

8.1.7. 吖啶酮类(Acridinones)

8.1.8. 苯丙胺类（Phenylpropylamines）

8.1.9. 苄基四氢异喹啉类(Benzyltetrahydroisoquinolines)

8.1.9.1. 苄基四氢异喹啉类 (Benzyltetrahydroisoquinolines)

8.1.9.2. 双苄基四氢异喹啉类 (Bisbenzyltetrahydrosisoquinolines)

8.1.9.2.1. 小蘖胺烷 (berbamans)

8.1.9.2.2. 氧卡萨烷 (oxyacanthans)

8.1.9.2.3. 筒箭碱类 (tubocurans)

8.1.9.2.4. 罗地辛碱 (Rodiasine)

8.1.9.3. 吗啡碱类 (Morphines)

8.1.9.4. 莲花烷碱类 (Hasubanonines)

8.1.9.5. 阿朴菲碱类 (Aporphines)

8.1.9.6. 原小蘖碱类 (Protoberberines)

- 8.1.9.7. 原托品类（普罗托品类） (Protopines)
- 8.1.9.8. 苯菲定碱类 (Benzophenanthridines)
- 8.1.9.9. 丽春花碱类 (Rhoeadines)

- 8.1.10. 苯乙基四氢异喹啉类 (Phenethyltetrahydroisoquinolines)
 - 8.1.10.1. 秋水仙碱类 (Colchicines)
 - 8.1.10.2. 粗榧碱类 (Cephalotaxines)
 - 8.1.10.3. 刺桐碱类 (Erythrines)
 - 8.1.10.4. 高刺桐碱类 (Homoerythrines)

- 8.1.11. 苄基苯乙胺类(Benzylphenethylamines)
 - 8.3.11.1. 石蒜碱类 (Lycorines)
 - 8.1.11.2. 石蒜伦碱类 (Lycorenines)
 - 8.1.11.3. 文殊兰碱类 (Crinines)
 - 8.1.11.4. 加兰他敏类 (Galanthamines)

- 8.1.12. 吐根碱类(Emetines)

- 8.1.13. 半萜吲哚碱类(Semiterpenoid indoles)

- 8.1.14. 单萜吲哚碱类(Monoterpenoid indoles)
 - 8.1.14.1. 长春花生物碱类（文可生碱类） (Vincosines)
 - 8.1.14.2. 柯南因碱类 (Corynantheines)
 - 8.1.14.3. 老刺木碱类 (Vobasine alkaloids)
 - 8.1.14.4. 1, 16-环柯南烷类 (1, 16-cyclocorynans)
 - 8.1.14.5. 瓦来西亚碱类 (Vallesiachotamines)
 - 8.1.14.6. 氧杂育亨宾碱类 (Oxyyohimbines)
 - 8.1.14.7. 育亨宾碱类 (Yohimbines)
 - 8.1.14.8. 沙巴精类 (Sarpagines)
 - 8.1.14.9. 阿枯米林类 (Akuammilines)
 - 8.1.14.10. 阿马林类（萝芙木碱类）(Ajmalines)
 - 8.1.14.11. 康狄卡品碱类 (Condylocarpan alkaloids)
 - 8.1.14.12. 阿枯米辛碱类 (Akuamicines)
 - 8.1.14.13. 钩藤碱类 (Rhynchophyllines)
 - 8.1.14.14. 台湾钩藤碱类 (Formosanines)
 - 8.1.14.15. 钩吻碱类 (Gelsemines)
 - 8.1.14.16. 伊波鲁顿碱类 (Iboluteines)
 - 8.1.14.17. 花冠木碱类 (Stemmadenines)
 - 8.1.14.18. 土的宁碱类 或 番木鳖碱类 (Strychnines)
 - 8.1.14.19. 白坚木碱类 (Aspidospermines)
 - 8.1.14.20. 白坚木替宁类 (Aspidofractinines)
 - 8.1.14.21. 文朵灵宁碱类 (Vindolinines)或环白坚木碱类 (Cycloaspidospermidines)
 - 8.1.14.22. 伊波南生物碱类 (Eburnas)
 - 8.1.14.23. 文卡明碱类 (Vincamines)

- 8.3.14.24. 白雀胺碱类 (Quebrachamines)
- 8.1.14.25. 依波加明碱类 (Ibogaines)
- 8.1.14.26. 克里瓦明碱类 (Cleavamines) 或 5,18-断-依波加明碱类 (5,18-seco-ibogamines)
- 8.1.14.27. 塔卡明碱类 (Tacamines)
- 8.1.14.28. 土布洛生碱类 (Tubulosines)
- 8.1.14.29. 喜树碱类 (Camptoteicines)
- 8.1.14.30. 奎宁类 (Cinchonines)

- 8.1.15. 倍半萜生物碱类 (Sesquiterpenoid alkaloids)
 - 8.1.15.1. 石斛碱类 (Dendrobines)

- 8.1.16. 二萜生物碱类(Diterpenoid alkaloids)
 - 8.1.16.1. 乌头碱类 (Aconitines)
 - 8.1.16.2. 阿替生类 (Atisines)
 - 8.1.16.3. 光翠雀碱类 (Denudatines)
 - 8.1.16.4. 海替定类 (Hetidines)
 - 8.1.16.5. 海替生类 (Hetisines)
 - 8.1.16.6. 欧乌头碱类 (Napellines)

- 8.1.17. 三萜生物碱类(Triterpenoid alkaloids) 或虎皮楠生物碱(*Daphniphyllum* alkaloids)
 - 8.1.17.1. 虎皮楠碱类(Daphniphyllines)
 - 8.1.17.2. 育瑞利碱类 (Yuzurines)
 - 8.1.17.3. 育瑞利明碱类 (Yuzurimines)

- 8.1.18. 甾体生物碱类(Steroid alkaloids)
 - 8.1.18.1. 孕甾烷-胺类 (Pregnan-amine)
 - 8.1.18.2. 地麻素类甾体生物碱 (Conanine alkaloids)
 - 8.1.18.3. 藜芦碱类 (Veratramines)
 - 8.1.18.4. 维藜芦碱类 (Veralkamines)
 - 8.1.18.5. 茄啉类生物碱 (Solanidine alkaloids)
 - 8.1.18.6. 螺茄碱类 (Spirosolanidines)
 - 8.1.18.7. 西藜芦碱类 (Cevanines)

- 8.1.19. 嘌呤类(Purines)

8.2. 萜类 (terpene)

萜类化合物在自然界中大量存在，在陆地和海洋生物中均有广泛分布，其类型繁多，数量巨大，据报道已分离、鉴定的萜类化合物超过 3 万个，为各类天然产物分子中已知数量最多的一类。萜类是一类由不同数目的异戊二烯结构首尾相连而构成分子骨架的天然化合物，这是从结构形式上给萜类提出的定义，也就是早年所谓的萜类的‘异戊二烯规则’。但是天然界的萜类数目巨大，分子骨架的类型千变万化，有些分子骨架中异戊二烯结构单元也并非全是首尾相连，甚至碳原子的数目也不正好是 5 的整数倍。

萜类按照异戊二烯的数目可分成单萜、倍半萜、二萜、二倍半萜、三萜、四萜及多萜等。每一类萜则又可按其分子结构类型、环的数目、环的类型以及环上取代基状况再进一步地分门别类。下面从半系统命名考虑出发，列出主要类别中较常见的萜类母体氢化物。由各类萜类母体氢化物衍生化合物的半系统命名按前述命名通则进行。

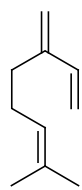
8.2.1. 单萜 (monoterpenoids)

从结构上单萜化合物按环系又可分成无环、单环、双环和特殊环系几类。

8.2.1.1. 无环单萜 (acyclic monoterpenoids)

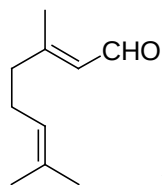
无环单萜的母体氢化物为 2,6-二甲基庚烷，一般无环单萜的天然产物均有它们长期使用的俗名，或可使用系统命名，不使用，也无必要使用半系统命名。

例：



俗名：β-月桂烯(β-myrcene)；

系统名：7-甲基-3-甲亚基庚-1,6-二烯 (7-methyl-3-methylene-octa-1,6-diene)



俗名：香叶醛 (geranial), E-柠檬醛 (E-citral)；

系统名：(2E)-3,7-二甲基庚-2,6-二烯醛 ((2E)-3,7-dimethyl-octa-2,6-dienal)

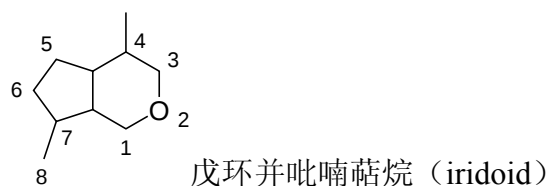
8.2.1.2. 单环单萜

8.2.1.2.1. 环丙烷单萜 (cyclopropane monoterpenoids)

三员环单环单萜在天然存在不多，如除虫菊中的菊酸 (chrysanthemic acid) 等，不使用半系统命名。

8.2.1.2.2. 戊环并吡喃单萜 (iridoid monoterpenoids)

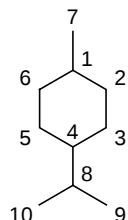
自然界存在的此类单萜是以四氢-4,7-二甲基-戊环并[c]吡喃为其基本骨架，此骨架称戊环并吡喃萜烷 (iridoid)。由于此类天然产物结构中通常含有烯醚结构，因此中文中也被称为环烯醚萜类。一般不采用半系统命名。



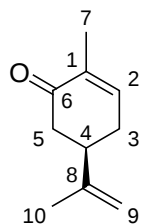
8.2.1.2.3. 环己烷单萜 (cyclohexane monoterpene)

此类单萜主要为对-甲基(异丙基)环己烷的衍生物，除俗名外常采用半系统命名。

母体氢化物：对-薄荷烷 (对-(⁺孟)烷) (*p*-menthane)



例：



半系统命名：(*R*)-对-薄荷-1,8-二烯-6-酮 ((*R*)-*p*-mentha-1,8-dien-6-one)

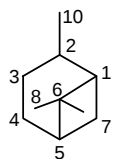
俗名：(-)-香芹酮 ((-)-carvone)

8.2.1.3. 二环单萜

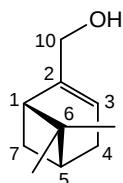
二环单萜主要有蒎烷类 (pinanes)，樟烷类 (camphanes) (包括异樟烷类，isocamphanes)，莜烷类 (fenchanes)，莈烷类 (caranes) 和 桉烷类 (thujanes)。

8.2.1.3.1. 蒎烷类 (pinanes)

母体氢化物：蒎烷 (pinane)



例：

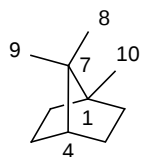


半系统命名：(1*S*,5*R*)-蒎-2-烯-10-醇 ((1*S*,5*R*)-pin-2-en-10-ol)

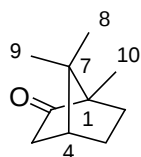
俗名：桃金娘醇 (myrtenol)

8.2.1.3.2. 樟烷类 (蒎烷类) (camphanes, bornanes)

母体氢化物：蒎烷 (bornane)



例：

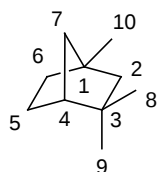


半系统命名：(+)-蒎-2-酮 ((+)-bornan-2-one)

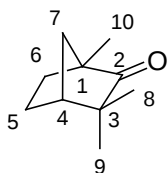
俗名：(+)-樟脑 ((+)-camphor)

8.2.1.3.3. 莜烷类 (fenchanes)

母体氢化物：莜烷 (fenchane)



例：

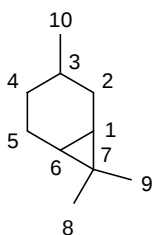


半系统命名: (1*R*)-葑-2-酮 ((1*R*)-fench-2-one)

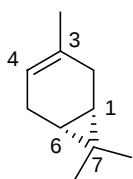
俗名: 茴香酮 ((-)-fenchone)

8.2.1.3.4. 薷(kai)烷类(caranes)

母体氢化物: 薷烷(carane)



例:

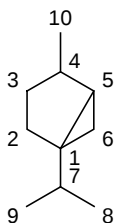


半系统命名: (1*S*,6*R*)-薷-3-烯 ((1*S*,6*R*)-car-3-ene)

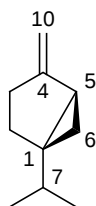
俗名: (S)-(+)-薷-3-烯 ((S)-(+)-car-3-ene)

8.2.1.3.5. 桉(zhu)烷类(侧柏烷类)(thujanes)

母体氢化物: 桉烷(thujane)



例:



半系统命名: (1*R*,5*R*)- α -4(10)-烯 ((1*R*,5*R*)-thuj-4(10)-ene)

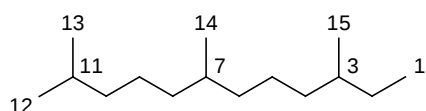
俗名: 香桉烯 ((+)-sabinene)

8.2.2. 倍半萜 (sesquiterpenes)

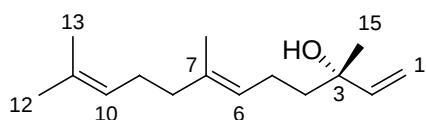
8.2.2.1. 无环倍半萜

8.2.2.1.1. 金合欢烷类(法呢烷类) (farnesanes)

母体氢化物: 金合欢烷 (法呢烷) (farnesane)



例:



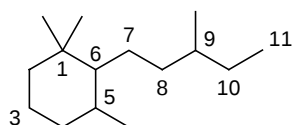
半系统命名: (3*S*,6*E*)-金合欢-1,6,10-三烯-3-醇 ((3*S*,6*E*)-farnesa-1,6,10-trien-3-ol)

俗名: (+)-*E*-橙花叔醇 ((+)-*E*-nerolidol)

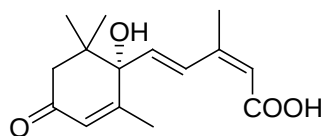
8.2.2.2. 单环倍半萜

8.2.2.2.1. 环金合欢烷类 (cyclofarnesanes)

母体氢化物: 环金合欢烷 (cyclofarnesane)



例:



半系统命名: (6*S*,7*E*,9*Z*)-6-羟基-3-氧亚基环金合欢-7,9-二烯-11-酸

((6*S*,7*E*,9*Z*)-6-hydroxy-3-oxo-cyclofarnesa-7,9-dien-11-oic acid)

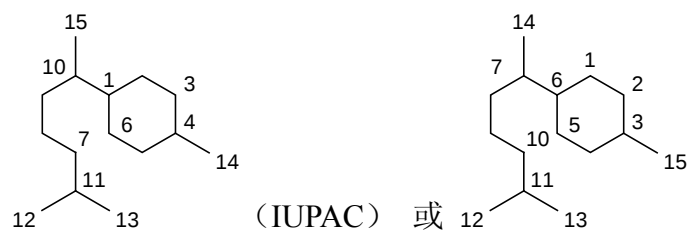
俗名: 脱落酸 (abscisic acid)

系统命名: (2*Z*,4*E*,5*S*)-5-(1-羟基-2,6,6-三甲基-4-氧亚基环己-2-烯-1-基)-3-甲基-戊二烯酸

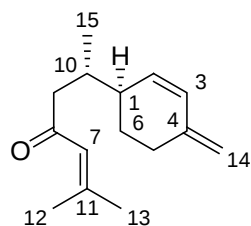
((2*Z*,4*E*,5*S*)-5-(1-hydroxy-2,6,6-trimethyl-4-oxo-cyclohex-2-en-1-yl)-3-methyl-penta-2,4-dienoic acid)

8.2.2.2.2. 没药烷类 (bisabolanes)

母体氢化物：没药烷型 (bisabolane)



例：



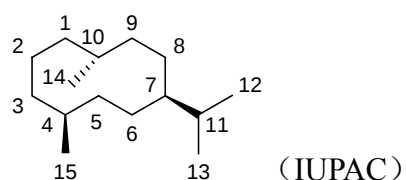
半系统命名：(1*S*,10*S*)-没药-2,4(14),7(11)-三烯-8-酮

((1*S*,10*S*)-bisabola-2,4(14),7(11)-trien-8-one)

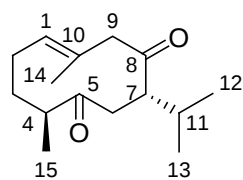
俗名：姜黄新酮 (curlone, turmerone)

8.2.2.2.3. 吉玛烷类 (germacranes)

母体氢化物：吉玛烷 (germacrane)

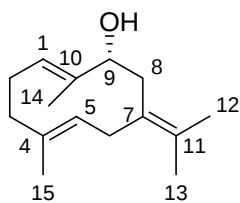


例：



半系统命名：(1*E*)-7-*epi*-吉玛-1(10)-烯-5,8-二酮 ((1*E*)-7-*epi*-germacr-1(10)-en-5,8-dione)

俗名：莪术二酮 (curdione)



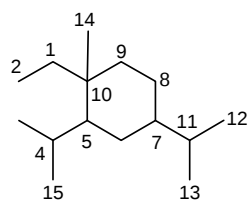
半系统命名: (1*E*,4*E*)-吉玛-1(10),4,7(11)-三烯-9 α -醇

((1*E*,4*E*)-germacra-1(10),4,7(11)-trien-9 α -ol)

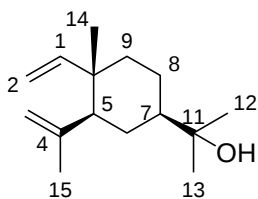
俗名: 大牻牛儿三烯醇

8.2.2.2.4. 榄烷类 (elemanes)

母体氢化物: 榄烷 (elemane)



例:

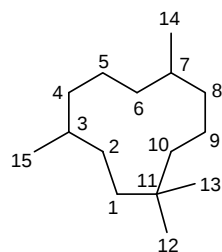


半系统命名: (5*S*,7*R*,10*S*)-榄-1,3-二烯-11-醇 ((5*S*,7*R*,10*S*)-elema-1,3-dien-11-ol)

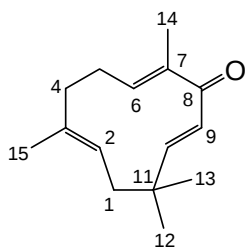
俗名: 榄香醇 ((-)- β -elemol)

8.2.2.2.5. 葎草烷类 (humulanes)

母体氢化物: 葎草烷 (humulane)



例:



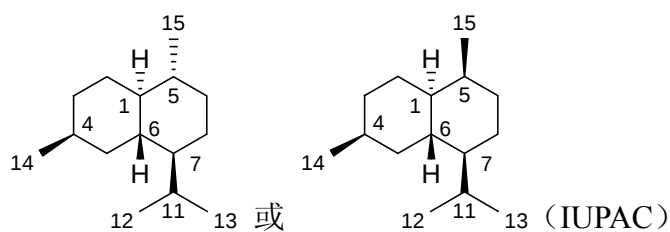
半系统命名：(2*E*,6*E*,9*E*)-葎草-2,6,9-三烯-8-酮 ((2*E*,6*E*,9*E*)-humula-2,6,9-trien-8-one)

俗名：球姜酮 (zurembone)

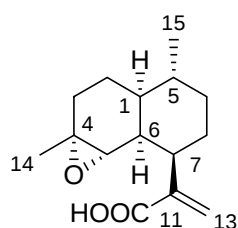
8.2.2.3. 二环倍半萜

8.2.2.3.1. 杜松烷类 (cadinanes)

母体氢化物：杜松烷 (cadinane)



例：



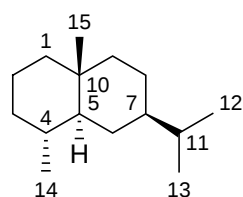
半系统命名：4 α ,5 α -氧桥-6 α -杜松-11(13)-烯-12-酸

(4 α ,5 α -epoxy-6 α -cardin-11(13)-en-12-oic acid)

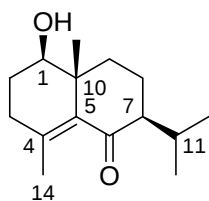
俗名：环氧青蒿酸 (epoxyartemisinic acid)

8.2.2.3.2. 桉烷类 (eudesmanes)

母体氢化物：桉烷 (eudesmane)



例：

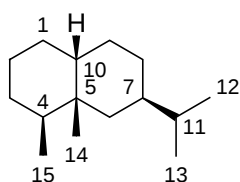


半系统命名：1 β -羟基-桉-4-烯-6-酮（1 β -hydroxy-eudesm-4-en-6-one）

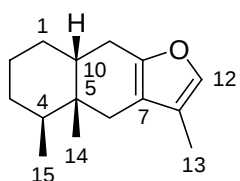
俗名：菖蒲醇（acorusnol）

8.2.2.3.3. 佛术烷类（eremophilanes）

母体氢化物：佛术烷（eremophilane）



例：

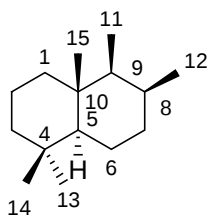


半系统命名：8,12-氧桥佛术-7,11-二烯（8,12-epoxy-eremophila-7,11-diene）

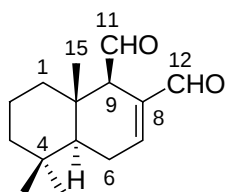
俗名：呋喃佛术烷（furanoeremophilane）

8.2.2.3.4. 二环金合欢烷类（辛辣木烷类）（drimanes）

母体氢化物：辛辣木烷（drimane）



例：

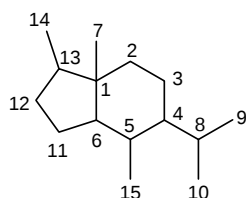


半系统命名：辛辣木-7-烯-11,12-二醛（drim-7-en-11,12-dial）

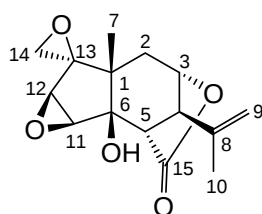
俗名：水蓼二醛（polygodial）

8.2.2.3.5. 苦味毒烷类（picrotoxanes）

母体氢化物：苦味毒烷（picrotoxane）



例：



半系统命名：(1*R*,5*S*)-11 β ,12 β :13 β ,14-二氧桥-6 β -羟基-苦味毒-8-烯-15,3 α -内酯

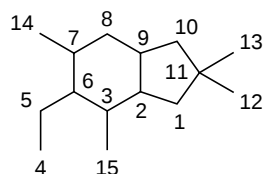
((1*R*,5*S*)-11 β ,12 β :13 β ,14-diepoxy-6 β -hydroxy-picrotox-8-en-15,3 α -olide)

俗名：马桑毒素（coriamyrtin）

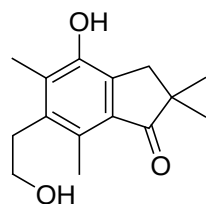
8.2.2.3.6. 伊鲁达烷类（illudalanes）

母体氢化物：伊鲁达烷（illudalane）

此类也可归入伊鲁烷类(illudane)（见 8.2.2.4.11）以 4,6-断伊鲁烷(4,6-seco-illudane)为母体氢化物进行半系统命名。



例：



半系统命名：4,8-二羟基-2,3,6,7,8,9-六脱氢伊鲁达-1-酮

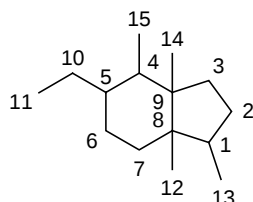
(4,8-dihydroxy-2,3,6,7,8,9-hexadehydroilludalan-1-one)

俗名：金粉蕨素（onitin）

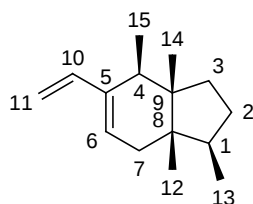
8.2.2.3.7. 绿苔烷类（pinguisanes）

绿苔烷类倍半萜不是由三异戊二烯单元首尾相连而得，而且还有甲基的迁移。

母体氢化物：绿苔烷（pinguisane）



例：



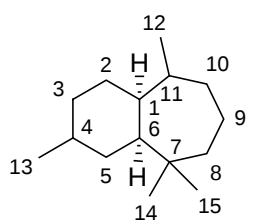
半系统命名：(1R,4R,8S,9S)-绿苔-5,10-二烯 ((1R,4R,8S,9S)-pinguisa-5,10-diene)

俗名：(-)- α -绿苔烯 ((-)- α -pinguisine)

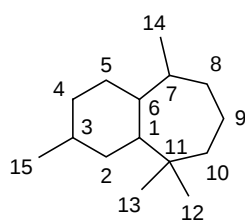
8.2.2.3.8. 喜马偕尔*烷类（himachalanes）

*按印度地名翻译。

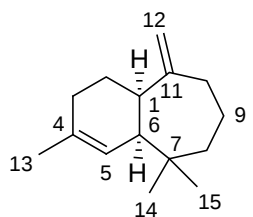
母体氢化物：喜马偕尔烷（himachalane）



(IUPAC)



例：



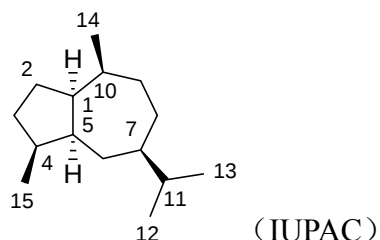
半系统命名：(-)-喜马偕尔-4,11-二烯 ((-)-himachala-4,11-diene)

俗名： α -喜马偕尔(雪松)烯 (α -himachalene)

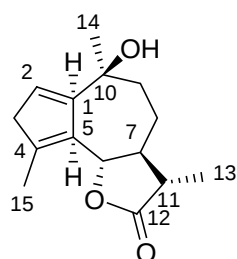
8.2.2.3.9. 愈创木烷类 (guaianes)

愈创木烷类是较大的一类倍半萜, 包括断-、环-、迁-、降-和伪愈创木烷倍半萜 (seco-, cyclo-, abeo-, nor-, and pseudo-guaiane), 它们均可以愈创木烷为母体氢化物进行半系统命名。

母体氢化物: 愈创木烷 (guaiane)



例:



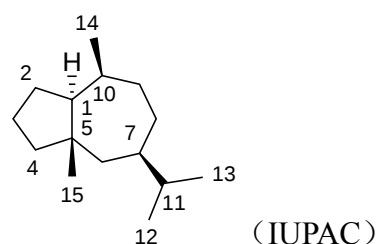
半系统命名: 10 β -羟基愈创木-1,4-二烯-12,6-内酯

(10 β -dihydroxy-guaia-1,4-dien-12,6-olide)

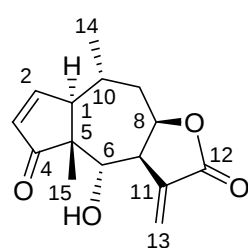
俗名: (-)-洋艾内酯 ((-)-artabsin)

伪愈创木烷倍半萜 (pseudoguaiane) 英文也称 ambrosane, 为愈创木烷上 4-位甲基移至 5-位后形成的结构。

母体氢化物: 伪愈创木烷 (pseudoguaiane, ambrosane)



例:



半系统命名: 6 α -羟基-4-氧亚基-伪愈创木-2,11(13)-二烯-12,8-内酯

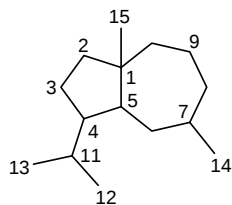
(6 α -hydroxy-4-oxo-pseudoguaia-2,11(13)-dien-12,8-olide)

(6 α -hydroxy-4-oxo-ambrosa-2,11(13)-dien-12,8-olide)

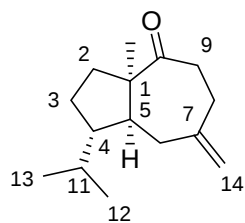
俗名：堆心菊灵 (helenalin)

8.2.2.3.10. 异胡萝卜烷类 (isodaucanes)

母体氢化物：异胡萝卜烷 (isodaucane)



例：

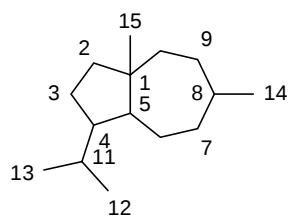


半系统命名：异胡萝卜-7(14)-烯-10-酮 (isodauc-7(14)-en-10-one)

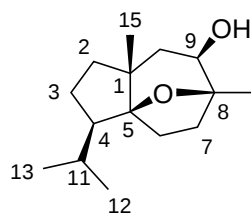
俗名：

8.2.2.3.11. 胡萝卜烷类 (daucanes)

母体氢化物：胡萝卜烷 (daucane)



例：



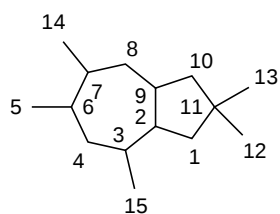
半系统命名：(-)-5,8-氧桥胡萝卜-9-醇 ((-)-5,8-epoxy-daucan-9-ol)

俗名：胡萝卜醇 (daucol)

8.2.2.3.12. 乳菇烷类 (lactaranes)

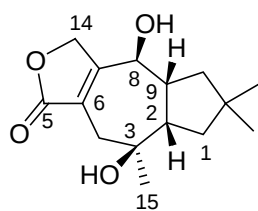
形式上可看作是马瑞斯姆烷类 (marasmane) 骨架 (见 8.2.2.4.8) 中的 C3-C6 键打开而得的一类型倍半萜。

母体氢化物: 乳菇烷 (lactarane)



(按生源前体金合欢烷编号系统)

例:

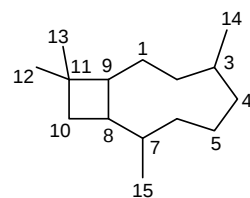


半系统命名: 3,8-二羟基乳菇-6-烯-5,14-内酯 (3,8-dihydroxylactar-6-en-5,14-olide)

俗名: 淡红乳菇素 A (lactarorufin A)

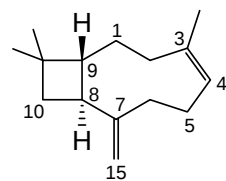
8.2.2.3.13. 石竹烷型 (caryophyllanes)

母体氢化物: 石竹烷 (caryophyllane)



(IUPAC)

例:

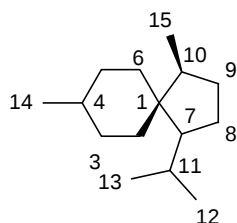


半系统命名: (8S,9R)-石竹-3,7(15)-二烯 ((8S,9R)-caryophylla-3,7(15)-diene)

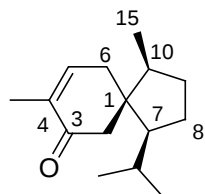
俗名: β -石竹烯 (β -caryophyllene)

8.2.2.3.14. 菖蒲烷型 (acoranes)

母体氢化物: 菖蒲烷 (acorane)



例:

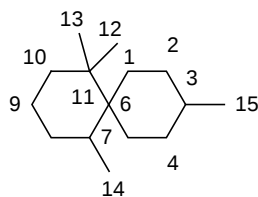


半系统命名: (-)-菖蒲-4-烯-3-酮 ((-)-acor-4-en-3-one)

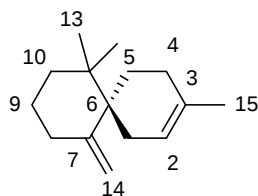
俗名: 菖蒲螺环烯酮 (acorenone)

8.2.2.3.15. 花柏烷类 (chamigranes)

母体氢化物: 花柏烷 (chamigrane)



例:

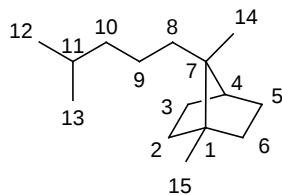


半系统命名: (6R)-花柏-2,7(14)-二烯 ((6R)-chamigra-2,7(14)-diene)

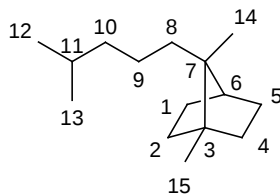
俗名: β -花柏烯 (β -chamigrene)

8.2.2.3.16. 樟树烷类 (camphenanes)

母体氢化物: 樟树烷 (camphenane)

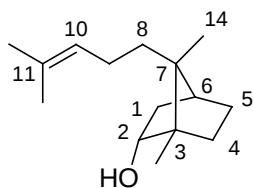


(IUPAC)



(生源编号)

例:



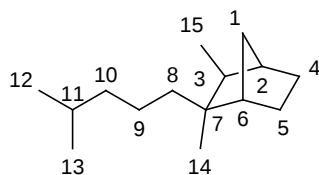
半系统命名: (1*R*, 2*S*, 4*R*, 7*S*)-樟树-10-烯-2-醇 ((1*R*, 2*S*, 4*R*, 7*S*)-campheren-10-en-2-ol)

(2*S*, 3*R*, 6*R*, 7*S*)-樟树-10-烯-2-醇 ((2*S*, 3*R*, 6*R*, 7*S*)-campheren-10-en-2-ol)

俗名: (-)-樟脑醇 ((-)-campherenol)

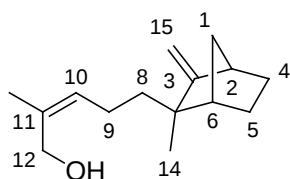
8.2.2.3.17. β -檀香烷类 (β -santalanes)

母体氢化物: β -檀香烷 (β -santalane)



(按生源前体金合欢烷编号系统)

例:



半系统命名: (-)-(10*Z*)- β -檀香-3(15),10-二烯-12-醇

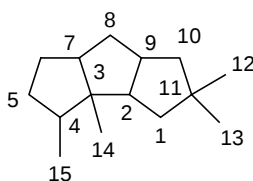
((-)-(10*Z*)- β -santala-3(15),10-dien-12-ol)

俗名: β -檀香醇 ((-)-(Z)- β -santalol)

8.2.2.4. 三环倍半萜

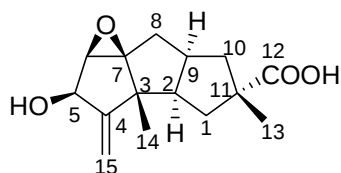
8.2.2.4.1. 樱草烷类 (hirsutanes)

母体氢化物: 樱草烷 (hirsutane)



(按生源前体金合欢烷编号系统)

例:



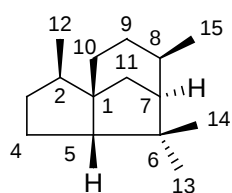
半系统命名: (+)-6,7-氧桥-5-羟基樱草-4(15)-烯-12-酸

((+)-6,7-epoxy-5-hydroxyhirsut-4(15)-en-12-oic acid)

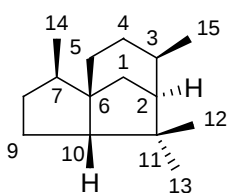
俗名: 樱草酸 (hirsutic acid)

8.2.2.4.2. 雪松烷类 (cedranes)

母体氢化物: 雪松烷 (cedrane)

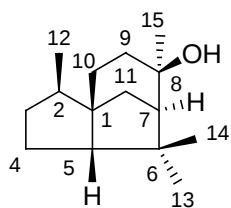


(IUPAC)



(按生源前体金合欢烷编号系统)

例:

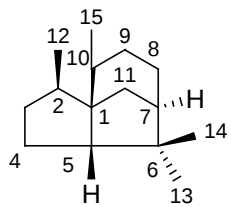


半系统命名: 雪松-8β-醇 (cedran-8β-ol)

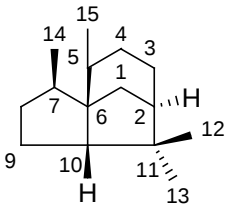
俗名: (+)-α-雪松醇 ((+)-α-cedrol)

8.2.2.4.3. 异雪松烷类 (isocedranes)

母体氢化物: 异雪松烷 (isocedrane)

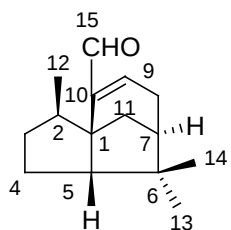


(IUPAC)



(按生源前体金合欢烷编号系统)

例:

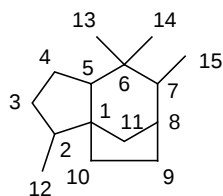


半系统命名：异雪松-9-烯-15-醛 (isocedr-9-en-15-al)

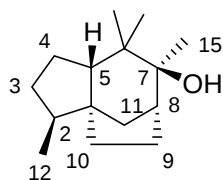
俗名：

8.2.2.4.4. 前深冬烷类 (prezizaanes)

母体氢化物：前深冬烷 (prezizaane)



例：

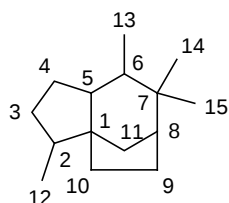


半系统命名：(-)-前深冬-7-醇 ((-)-prezinaan-7-ol)

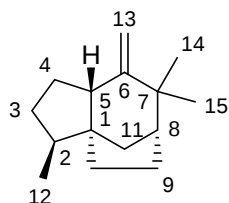
俗名：沉香⁺⁺奥醇 (jinkohol)

8.2.2.4.5. 深冬烷类 (zizaanes)

母体氢化物：深冬烷 (zizaane)



例：

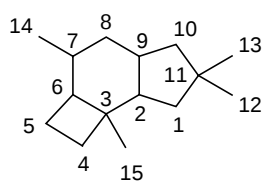


半系统命名：(+)-深冬-6(13)-烯 ((+)-ziza-6(13)-ene)

俗名：三环岸兰烯 (tricyclovetivene)

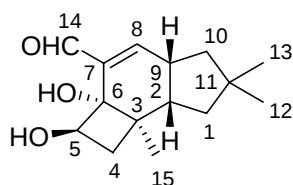
8.2.2.4.6. 原伊鲁烷类 (protoilludanes)

母体氢化物：原伊鲁烷（protoilludane）



（按生源前体金合欢烷编号系统）

例：



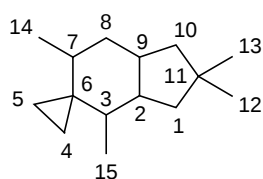
半系统命名：(+)-5 β ,6 α -二羟基-原伊鲁-7-烯-14-醛

((+)-5 β ,6 α -dihydroxy-protoillud-7-en-14-al)

俗名：（amillarin）

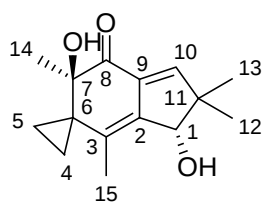
8.2.2.4.7. 伊鲁烷类（illudanes）

母体氢化物：伊鲁烷（illudane）



（按生源前体金合欢烷编号系统）

例：



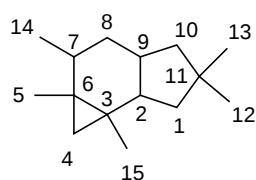
半系统命名：(-)-1 α ,7 β -二羟基-伊鲁-2,9-二烯-8-酮

((-)-1 α ,7 β -dihydroxy-illuda-2,9-dien-8-one)

俗名：（illudin M）

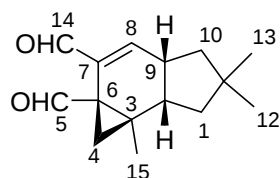
8.2.2.4.8. 马瑞斯姆烷类（marasmanes）

母体氢化物：马瑞斯姆烷（marasmane）



(按生源前体金合欢烷编号系统)

例:

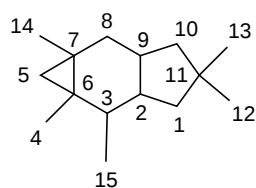


半系统命名: (+)-马瑞斯姆-7-烯-5,14-二醛 ((+)-marasm-7-en-5,14-dial)

俗名: 异绒白乳菇醛 (isovelleral)

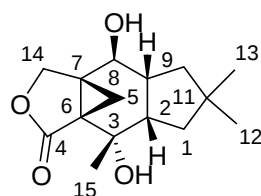
8.2.2.4.9. 异乳菇烷类 (isolactaranes)

母体氢化物: 异乳菇烷 (isolactarane)



(按生源前体金合欢烷编号系统)

例:



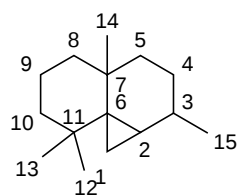
半系统命名: (2S,3S,6R,7R,8S,9R)-3,8-二羟基异乳菇-4,14-内酯

((2S,3S,6R,7R,8S,9R)-3,8-dihydroxy-isolactaran-4,14-olide)

俗名: 异淡红乳菇素 (isolactarorufin)

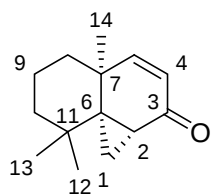
8.2.2.4.10. 罗汉柏烷类 (thujopsanes)

母体氢化物: 罗汉柏烷 (thujopsane)



(按生源前体金合欢烷编号系统)

例：

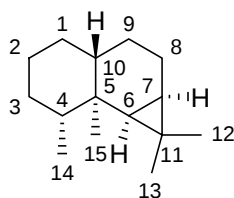


半系统命名：(+)-15-去甲基-罗汉柏-4-烯-3-酮 ((+)-15-nor-thujops-4-en-3-one)

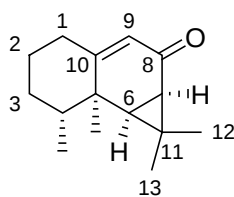
俗名：麦由酮 (mayurone)

8.2.2.4.11. 马兜铃烷类 (aristolanes)

母体氢化物：马兜铃烷类 (aristolanes)



例：



半系统命名：(-)-马兜铃-9-烯-8-酮 ((-)-aristol-9-en-8-one)

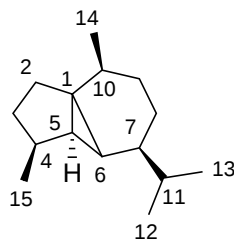
俗名：(aristolone)

8.2.2.4.12. 草澄茄烷类 (cubebanes)

此类也可归入愈创木烷类 (8.2.2.3.9) (guaianes) 以 1,6-环-愈创木烷

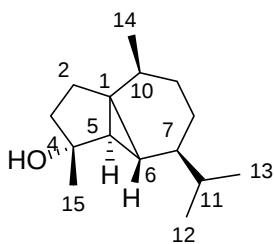
(1,6-cyclo-guaiane) 为母体氢化物进行半系统命名。

母体氢化物：草澄茄烷 (cubebane)



(IUPAC)

例：



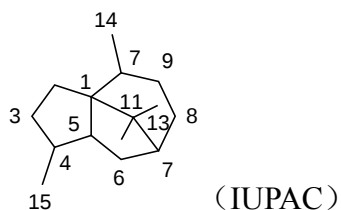
半系统命名: (-)-萆澄茄-4 α -醇 ((-)-cubeban-4 α -ol)

俗名: 萆澄茄醇 (cubebanol)

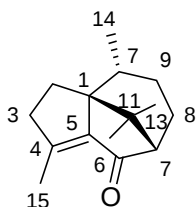
8.2.2.4.13. 广藿香烷类 (patchoulanes)

此类也可归入愈创木烷类 (8.2.2.3.9) (guaianes) 以环-愈创木烷 (1,11-cyclo-guaiane) 为母体氢化物进行半系统命名。

母体氢化物: 广藿香烷 (patchoulane)



例:



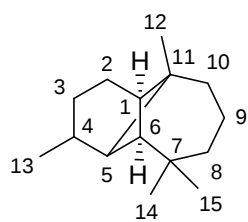
半系统命名: (-)-广藿香-4-烯-6-酮 ((-)-patchoul-4-en-6-one)

俗名: 广藿香烯酮 ((-)-patchoulenone)

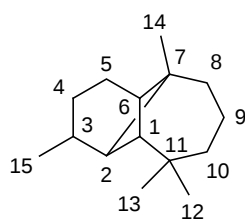
8.2.2.4.14. 长蒴烷类 (longipinanes)

此类也可归入喜马偕尔烷类 (8.2.2.3.8) (himachalanes) 以 5,11-环-喜马偕尔烷 (5,11-cyclo-himachalane) 为母体氢化物进行半系统命名。

母体氢化物: 长蒴烷 (longipinane)

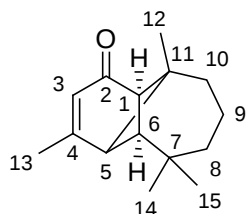


(IUPAC)



(按生源前体金合欢烷编号系统)

例:

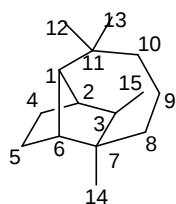


半系统命名: (+)-长蕨-3-烯-2-酮 ((+)-longipin-3-en-2-one)

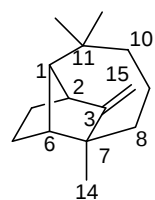
俗名: 茛蒿倍半萜酮 B (vulgaron B)

8.2.2.4.15. 长叶烷类 (longifolanes)

母体氢化物: 长叶烷 (longifolane)



例:



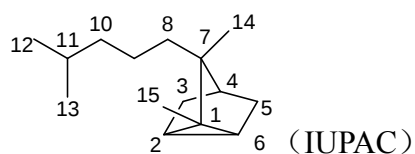
半系统命名: (-)-长叶-3(15)-烯 ((-)- longifol-3(15)-ene)

俗名: 长叶松烯 ((-)- longifolene)

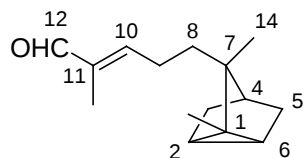
8.2.2.4.16. α -檀香烷 (α -santalanes)

此类也可归入樟树烷类 (8.2.2.3.16) (campherenanes) 以 2,6-环-樟树烷 (2,6-cyclo-campherenane) 为母体氢化物进行半系统命名。

母体氢化物: α -檀香烷 (α -santalane)



例:



半系统命名: (10*E*)- α -檀香-10-烯-12-醛 ((10*E*)- α -santal-10-en-12-al)

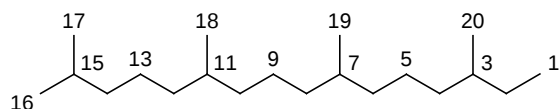
俗名: (+)-(*E*)- α -檀香醛 ((+)-(*E*)- α -santalal)

8.2.3. 二萜 (diterpenes)

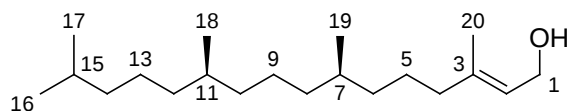
8.2.3.1. 无环和单环二萜 (acyclic and monocyclic diterpenes)

8.2.3.1.1. 植物烷类 (phytanes)

母体氢化物: 植(物)烷 (phytane)



例:

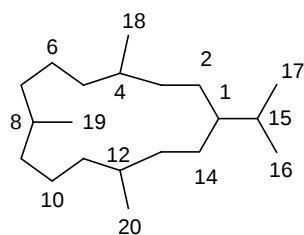


半系统命名: (+)-(2*E*,7*R*,11*R*)-植物-2-烯-1-醇 ((+)-(2*E*,7*R*,11*R*)-phyt-2-en-1-ol)

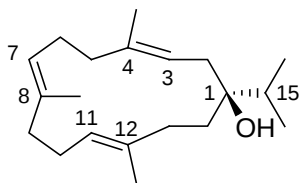
俗名: 植物醇 (phytol)

8.2.3.1.2. 烟草烷类 (cembranes)

母体氢化物: 烟草烷 (cembrane)



例:



半系统命名: (-)-(1*S*,3*E*,7*E*,11*E*)-烟草-3,7,11-三烯-1-醇

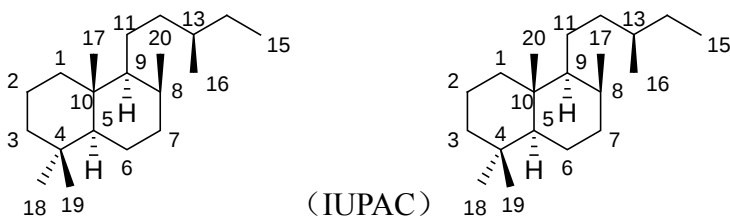
((-)-(1*S*,3*E*,7*E*,11*E*)-cembra-3,7,11-trien-1-ol)

俗名: (serratol)

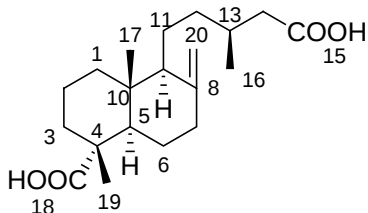
8.2.3.2. 双环二萜

8.2.3.2.1. 半日花烷类 (labdanes)

母体氢化物: 半日花烷 (labdane)



例:



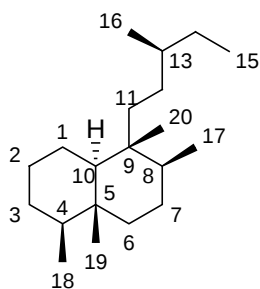
半系统命名: (+)-半日花-8(20)-烯-15,18-二酸 ((+)-labd-8(20)-en-15,18-dioic acid)

俗名: (pinifolic acid)

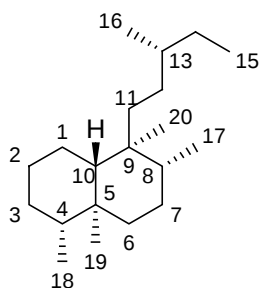
8.2.3.2.2. 克罗烷类 (clerodanes)

克罗烷类包括克罗烷, 对映-克罗烷 (*ent*-clerodane) 和顺-对映-克罗烷 (*cis-ent*-clerodane) 的化合物。

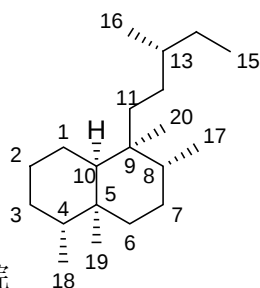
母体氢化物: 克罗烷 (clerodane)



对映-克罗烷和顺-对映-克罗烷：

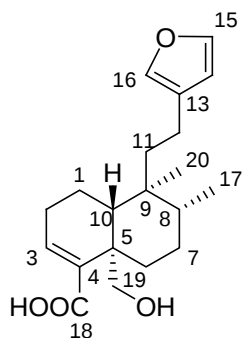


对映-克罗烷



顺-对映-克罗烷

例：



半系统命名：15,16-氧桥-19-羟基-对映克罗-3,13(16),14-三烯-18-酸

(15,16-epoxy-19-hydroxy-ent-cleroda-3,13(16),14-trien-18-oic acid)

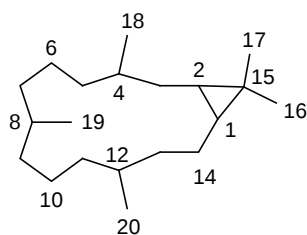
俗名：车桑子酸 (hautriwaic acid)

8.2.3.2.3. 西松烷类 (casbanes)

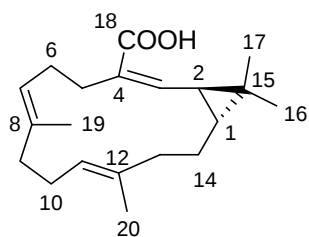
此类也可归入烟草烷类 (cembranes) (8.2.3.1.2) 以 2,15-环-烟草烷

(2,15-cyclo-casbane) 为母体氢化物进行半系统命名。

母体氢化物：西松烷 (casbane)



例：



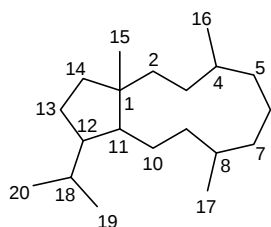
半系统命名：(1*R*,2*R*,3*Z*,7*E*,11*E*)-西松-3,7,11-三烯-18-酸

((1*R*,2*R*,3*Z*,7*E*,11*E*)-casba-3,7,11-trien-18-oic acid)

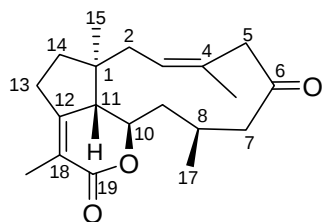
俗名：月腺大戟素 B (yuexiandajisu B)

8.2.3.2.4. 海兔烷类 (dolabellanes)

母体氢化物：海兔烷 (dolabellane)



例：



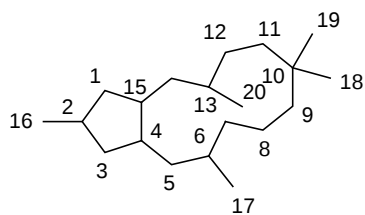
半系统命名：(1*S*,3*Z*,8*R*,10*R*,11*S*)-6-氧亚基海兔-3,12(18)-二烯-19,10-内酯

((1*S*,3*Z*,8*R*,10*R*,11*S*)-6-oxo-dolabella-3,12(18)-dien-19,10-olide)

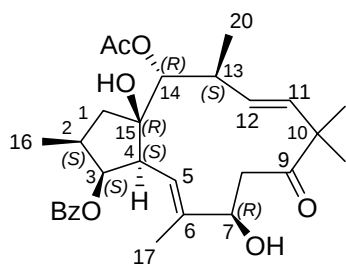
俗名：群柱内酯 (clavulactone)

8.2.3.2.5. 假白榄烷类 (jatrophanes)

母体氢化物：假白榄烷 (jatrophane)



例：



半系统命名: (2*S*,3*S*,4*S*,5*E*,7*R*,11*E*,13*S*,14*R*,15*R*)-14-乙酰氧基-3-苯甲酰基-7,15-二羟基假白榄-5,11-二烯-9-酮

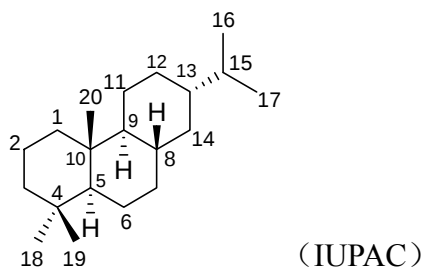
(2*S*,3*S*,4*S*,5*E*,7*R*,11*E*,13*S*,14*R*,15*R*)-14-acetoxy-3-benzoxy-7,15-dihydroxyjatropa-5,11-dien-9-one

俗名: 大戟二萜 F (euphorin F)

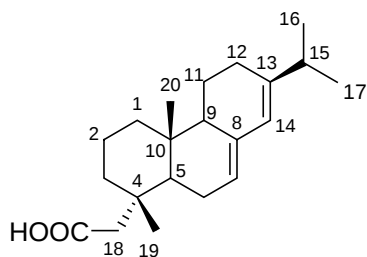
8.2.3.3. 三环二萜

8.2.3.3.1. 松香烷类 (abietanes)

母体氢化物: 松香烷 (abietane)



例:



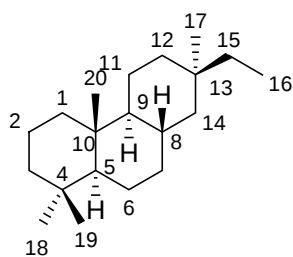
半系统命名: (-)-松香-7,13(14)-二烯-18-酸 ((-)-abiet-7,13(14)-diene-18-oic acid)

俗名: 松香酸 (Abietic acid)

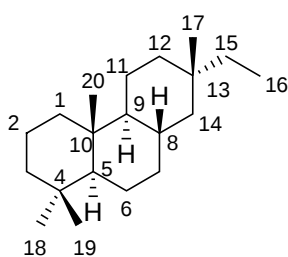
8.2.3.3.2. 海松烷类 (pimaranes)

海松烷 (pimarane) 的13-位差向异构体称异海松烷 (isopimarane)。

母体氢化物: 海松烷 (pimarane)

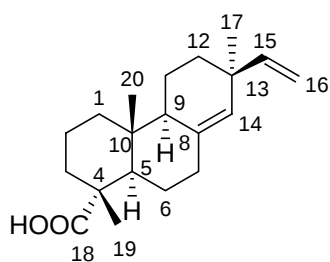


海松烷 (pimarane)



异海松烷 (isopimarane)

例:



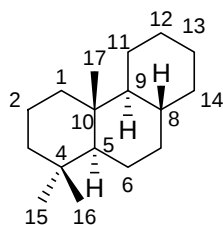
半系统命名: 海松-8(14),15-二烯-18-酸 (pimara-8(14),15-dien-18-oic acid)

俗名: 海松酸 (pimaric acid)

8.2.3.3.3. 罗汉松烷类 (podocarpanes)

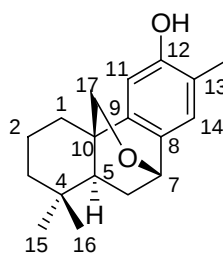
本类母体氢化物与松香烷和海松烷的A/B/C环相同。

母体氢化物: 罗汉松烷 (podocarpane)



(IUPAC)

例:



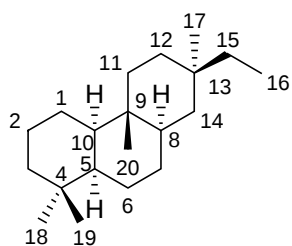
半系统命名: 7 β ,17-氧桥-13-甲基-罗汉松-8,11,13-三烯-12-醇

(7 β ,17-epoxy-13-methyl-podocarpa-8,11,13-trien-12-ol)

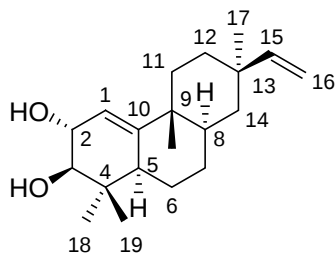
俗名: 紫丹参萜醚 (przewalskin)

8.2.3.3.4. 玫瑰烷类 (rosanes)

母体氢化物：玫瑰烷（rosane）



例：

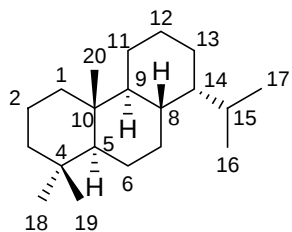


半系统命名：玫瑰-1(10),15-二烯-2 α ,3 β -二醇（rosa-1(10),15-dien-2 α ,3 β -diol）

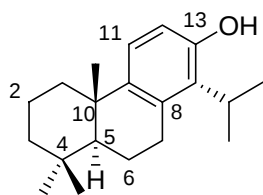
俗名：月腺大戟素 F（yuexiandajisu F）

8.2.3.3.5. 桃拓烷类（tolaranes）

母体氢化物：桃拓烷（tolarane）



例：

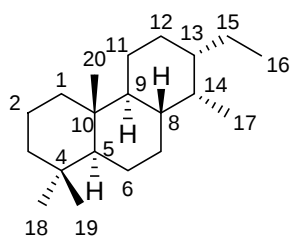


半系统命名：桃拓-8,11,13-三烯-13-醇（totara-8,11,13-trien-13-ol）

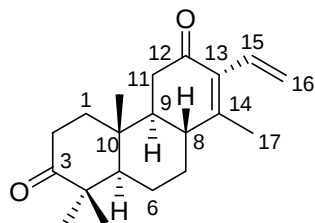
俗名：桃拓酚（tatarol）

8.2.3.3.6. 卡山烷类（cassanes）

母体氢化物：卡山烷（cassane）



例：

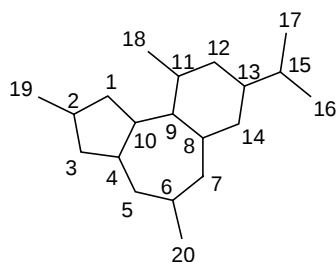


半系统命名：卡山-13,15-二烯-3,12-二酮 (cassa-13,15-dien-3,12-dione)

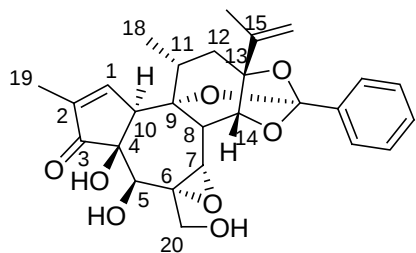
俗名：

8.2.3.3.7. 瑞香烷类 (daphnanes)

母体氢化物：瑞香烷 (daphnane)



例：



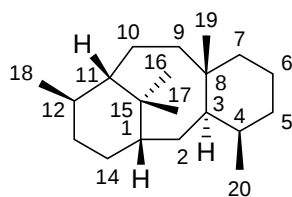
半系统命名：6,7-氧桥-4,5,9,13,14,20-六羟基瑞香-1,15-二烯-3-酮 9,13,14-原苯甲酸酯

(6,7-epoxy-4,5,9,13,14,20-hexahydroxy-daphna-1,15-dien-3-one 9,13,14-orthobenzoate)

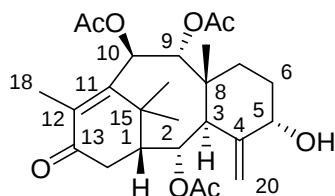
俗名：瑞香毒素 (daphnatoxin)

8.2.3.3.8. 紫杉烷类 (taxanes)

母体氢化物：紫杉烷 (taxane)



例:



半系统命名: $2\alpha,9\alpha,10\beta$ -三乙酰氧基- 5α -羟基紫杉-4(20),11-二烯-13-酮

($2\alpha,9\alpha,10\beta$ -triacetoxy- 5α -hydroxy-taxa-4(20),11-dien-13-one)

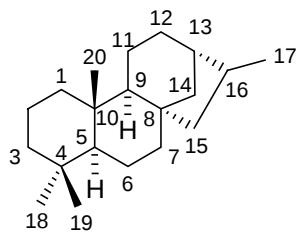
俗名: 紫杉素 A (taxinine A)

8.2.3.4. 四环二萜

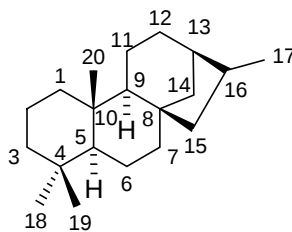
8.2.3.4.1. 贝壳杉烷类 (kauranes)

贝壳杉烷类包括对映贝壳杉烷类以及由它们结构衍生的类型是天然产物中发现较多的一类萜类。

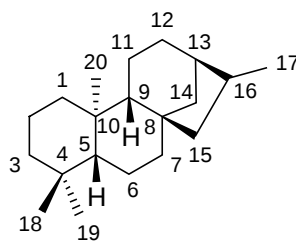
母体氢化物: 贝壳杉烷和对映贝壳杉烷 (kaurane, *ent*-kaurane)



贝壳杉烷 (IUPAC)



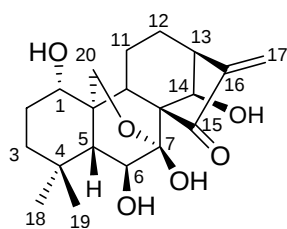
贝壳杉烷*



对映贝壳杉烷

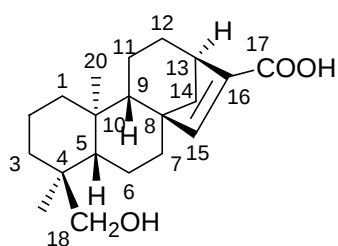
* 部份文献采用此 8,13-位构型翻转者为贝壳杉烷, 现建议不再使用。

例:



半系统命名：1 α ,6 β ,7 β ,14 β -四羟基-7 α ,20-环氧-对映-贝壳杉-16-烯-15-酮（1 α ,6 β ,7 β ,14 β -tetrahydroxy-7 α ,20-epoxy-*ent*-kaur-16-en-15-one）

俗名：冬凌草素 A（rubescensin A）

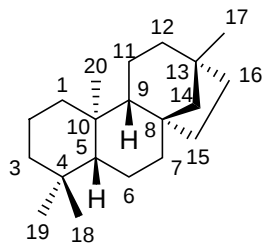


半系统命名：18-羟基-对映贝壳杉-15-烯-17-酸（18-hydroxy-*ent*-kaur-15-en-17-oic acid）

俗名：土荆皮酸 D（pseudolaric acid D）

8.2.3.4.2. 贝叶烷类（beyeranes）

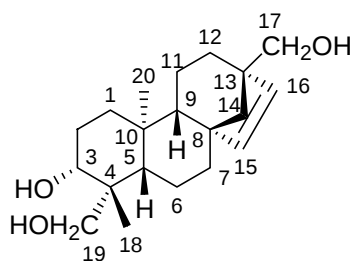
母体氢化物：贝叶烷（beyerane）



（IUPAC）*

* *Pure Appl. Chem.* **2004**, 76(6), 1283-1292

例：

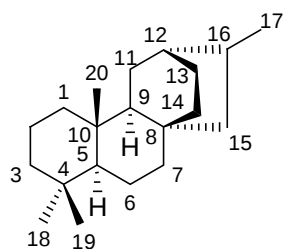


半系统命名：(+)-贝叶-15-烯-3 α ,17,19-三醇（(+)-beyer-15-en-3 α ,17,19-triol）

俗名：贝叶醇（beyerol）

8.2.3.4.3. 阿替生烷类 (atisane)

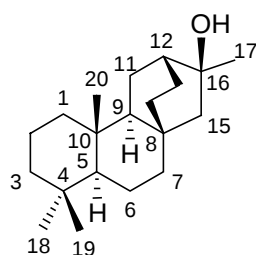
母体氢化物：阿替生烷 (atisane)



(IUPAC) *

* *Pure Appl. Chem.* **2004**, 76(6), 1283-1292

例：

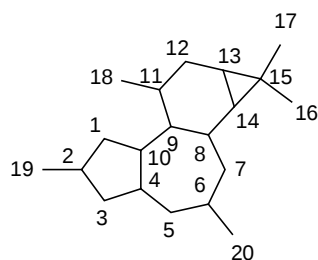


半系统命名：阿替生-16 β -醇 (antisan-16 β -ol)

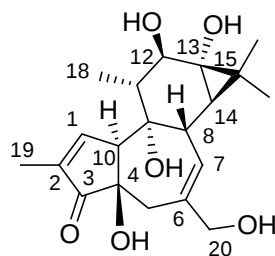
俗名：

8.2.3.4.4. 巴豆烷类 (tiglianes)

母体氢化物：巴豆烷 (tiglane)



例：



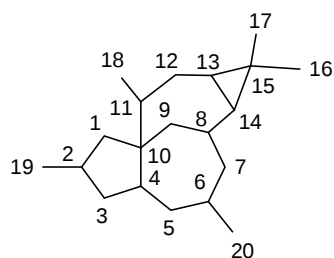
半系统命名：(+)-4 β ,9 α ,12 β ,13 α ,20-五羟基巴豆-1,6-二烯-3-酮

((+)-4 β ,9 α ,12 β ,13 α ,20-pentahydroxy-tiglia-1,6-dien-3-one)

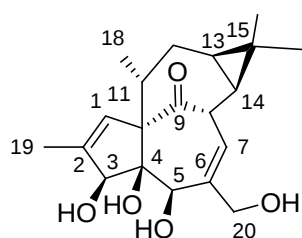
俗名：巴豆醇 (phorbol)

8.2.3.4.5. 巨大戟烷类 (ingenanes)

母体氢化物：巨大戟烷 (ingenane)



例：



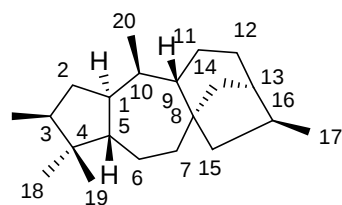
半系统命名：3 β ,4 β ,5 β ,20-四羟基巨大戟-1,6-二烯-9-酮

(3 β ,4 β ,5 β ,20-tetrahydroxy-ingena-1,6-dien-9-one)

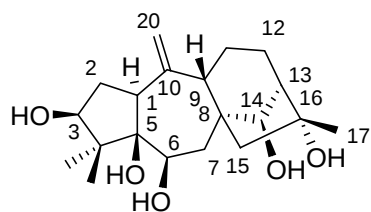
俗名：巨大戟萜醇 (Ingenol)

8.2.3.4.6. 木藜芦毒烷类 (grayanotoxanes)

母体氢化物：木藜芦毒烷 (grayanotoxane)



例：



半系统命名：(-)-木藜芦毒-10(20)-烯-3 β ,5 β ,6 β ,14 β ,16 α -五醇

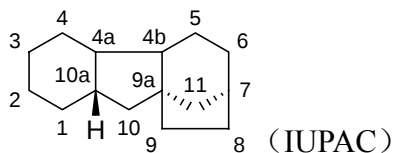
((-)-grayanotox-10(20)-ene-3 β ,5 β ,6 β ,14 β ,16 α -pentol)

俗名：木藜芦毒素 II (grayanotoxin II)

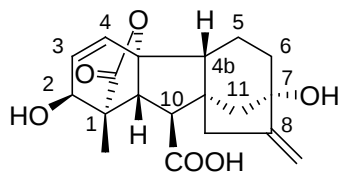
8.2.3.4.7. 赤霉烷类 (gibberellanes)

是一类少一个碳原子的二萜，半系统命名时的母体氢化物为 15 个碳原子的赤霉烷 (gibbane)。

母体氢化物：赤霉烷 (gibbane)



例：



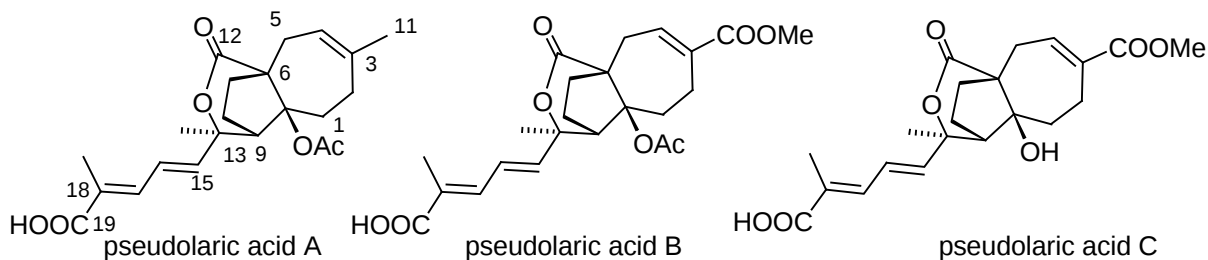
半系统命名：(4b β)-1 α ,4 α -碳内酯-2 β ,7-二羟基-1 β -甲基-8-甲亚基赤霉-3-烯-10 β -甲酸

((4b β)-1 α ,4 α -carb lactone-2 β ,7-dihydroxy-1 β -methyl-8-methylene-gibb-3-en-10 β -carboxylic acid)

俗名：赤霉酸，赤霉素 A₃ (gibberellic acid, gibberellin A₃)

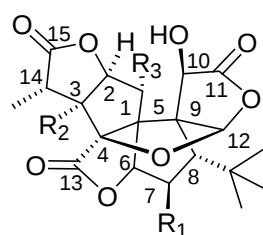
8.2.3.4.8. 异戊烯基倍半萜类 (prenylsesquiterpenes) 二萜

由一些类别的倍半萜侧链上连有异戊烯基而构成的一大类二萜在自然界中已有较多发现，如异戊烯基胡萝卜烷类 (Prenyldauncane (sphenolobane)) 的二萜土荆皮酸 A, B, C, (pseudolaric acid A, B, C)。但各具体类别中的化合物数目还不是很多，它们的半系统命名可参照相应的倍半萜母体氢化物进行，时编号系统需作相应变动。



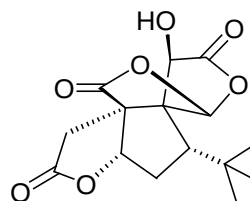
8.2.3.5. 银杏内酯类 (ginkgolide)

银杏内酯类是一类较为独特的，高度氧化的二萜，通常采用俗名命名，如银杏内酯 A, B, C, J, M (ginkgolide A, B, C, J, M)，以及少五个碳的白果内酯 (bilobalide)。



ginkgolide

	R ₁	R ₂	R ₃
A	H	OH	H
B	H	OH	OH
C	OH	OH	OH
J	OH	OH	H
M	OH	H	OH

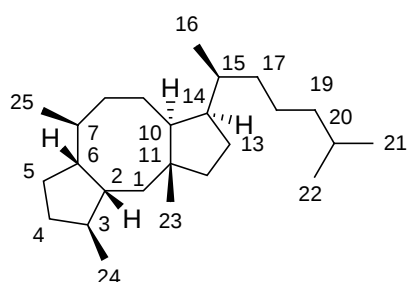


bilobalide

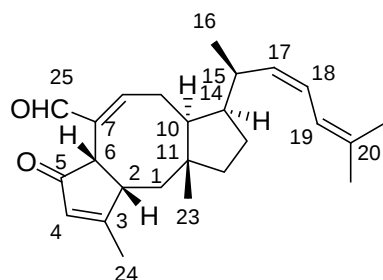
8.2.4. 二倍半萜 (sesterterpenes)

二倍半萜在自然界中较少发现，IUPAC 建议中仅收入了一类母体氢化物。

母体氢化物：蛇孢腔菌烷 (ophiobolane)



例：



半系统命名：(17Z)-5-氧亚基蛇孢腔菌-3,7,17,19-四烯-25-醛

((17Z)-5-oxo-ophiobola-3,7,17,19-tetraen-25-al)

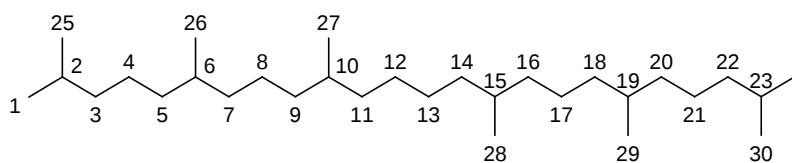
俗名：蛇孢腔菌素 G (ophiobolin G)

8.2.5. 三萜 (triterpenes)

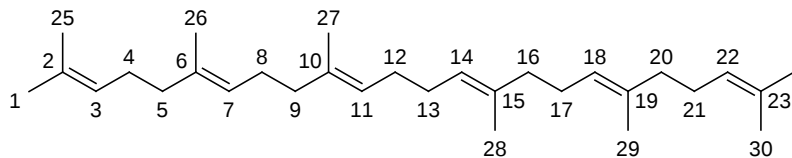
8.2.5.1. 无环三萜

化学系统命名为 2,6,10,15,19,23-六甲基-二十四烷-2,6E,10E,14E,18E,22-六烯 (2,6,10,15,19,23-hexamethyl-tetracosane-2,6E,10E,14E,18E,22-hexaene) 的直链三萜化合物的俗名为角鲨烯 (squalene) 它是众多三萜化合物的生源合成的前体。它和它的全氢化物一角鲨烷 (squalane) 可作为母体氢化物对它们的衍生物进行半系统命名。

母体氢化物：角鲨烷 (squalane)



角鲨烯 (squalene)



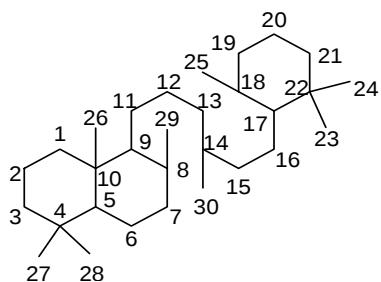
8.2.5.2. 单环、二环和三环三萜

8.2.5.2.1. 鸢尾醛类 (iridals) 三萜

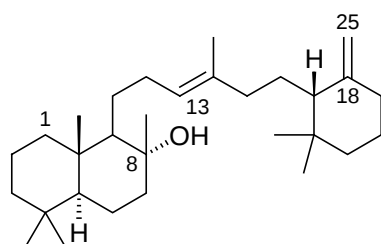
鸢尾醛类三萜自然界存在较少，是一类较独特的含 31 个碳原子的三萜，按俗名或系统命名。

8.2.5.2.2. 龙涎香烷类 (ambranes) 三萜

母体氢化物：龙涎香烷 (ambrane)



例：



半系统命名：(8*R*,13*E*)-龙涎香-13,18(25)-二烯-8-醇

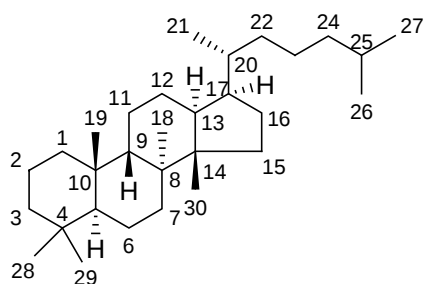
((8*R*,13*E*)-ambra-13,18(25)-dien-8 α -ol)

俗名：龙涎香 (ambrein)

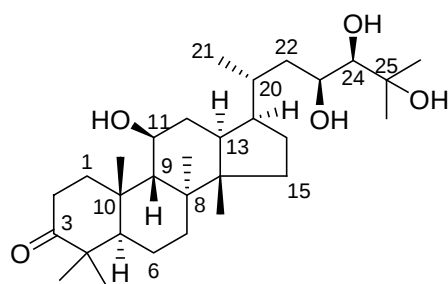
8.2.5.3. 甾烷类 (gonane) 四环三萜

8.2.5.3.1. 原萜烷类 (protostanes)

母体氢化物：原萜烷（protostane）



例：



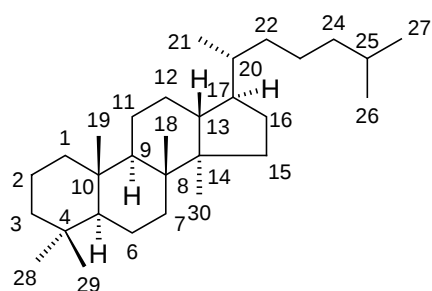
半系统命名：11 β ,23*S*,24*R*,25-四羟基原萜烷-3-酮

（11 β ,23*S*,24*R*,25-tetrahydroxy-protostan-3-one）

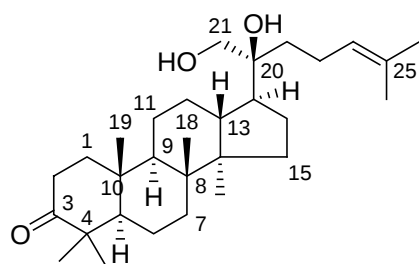
俗名：泽泻醇 A（alisol A）

8.2.5.3.2. 达玛烷类（dammaranes）

母体氢化物：达玛烷（dammarane）



例：

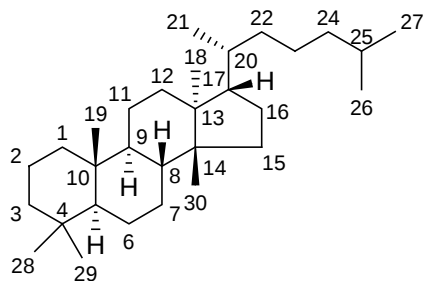


半系统命名：20(*S*),21-二羟基达玛-24-烯-3-酮 （20,21-dihydroxy-dammar-24-en-3-one）

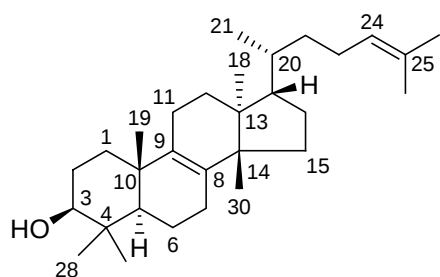
俗名：龙脑香二醇酮 （dryobalanone）

8.2.5.3.3. 大戟烷类 (euphanes)

母体氢化物：大戟烷 (euphane)



例：

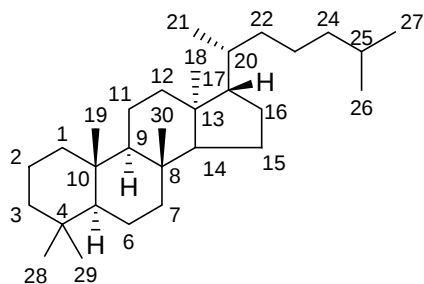


半系统命名：(+)-大戟-8,24-二烯-3 β -醇 ((+)-euphana-8,24-dien-3 β -ol)

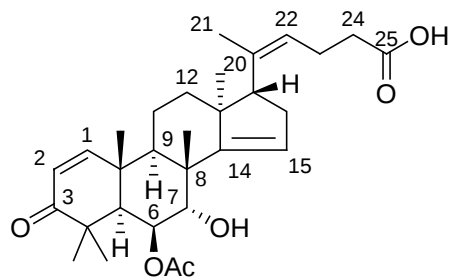
俗名：大戟醇 (γ -euphorbol, euphol, euphadienol)

8.2.5.3.4. 变构甘遂烷类 (apotirucallanes)

母体氢化物：变构甘遂烷 (apotirucallane)



例：



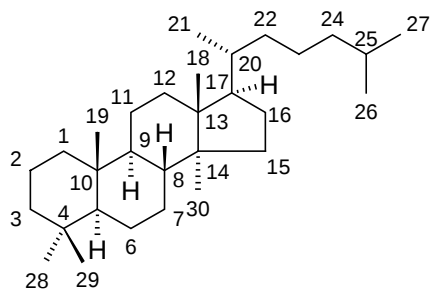
半系统命名：6 β -乙酰氧基-7 α -羟基-3-氧亚基-26,27-二失碳变构甘遂-1,14,20(22)-三烯-25-

酸 (6 β -acetoxy-7 α -hydroxy-3-oxo-26,27-dinorapotirucalla-1,14,20(22)-trien-25-oic acid)

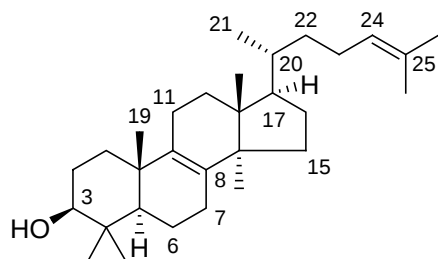
俗名: 印楝三萜酸 (azadirolic acid)

8.2.5.3.5. 羊毛甾烷类 (lanostanes)

母体氢化物: 羊毛甾烷 (lanostane)



例:

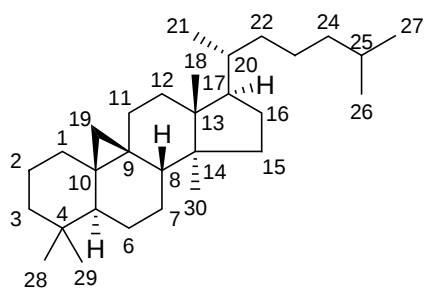


半系统命名: (+)-羊毛甾-8,24-二烯-3 β -醇 ((+)-lanosta-8,24-dien-3 β -ol)

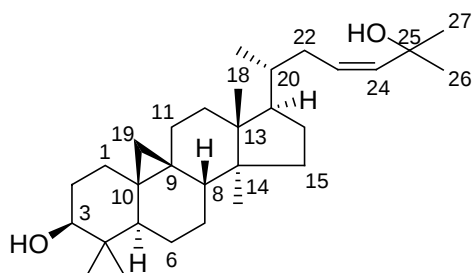
俗名: 羊毛甾醇 (lanosterol)

8.2.5.3.6. 环木菠萝烷类 (cycloartanes)

母体氢化物: 环木菠萝烷 (cycloartane)



例:

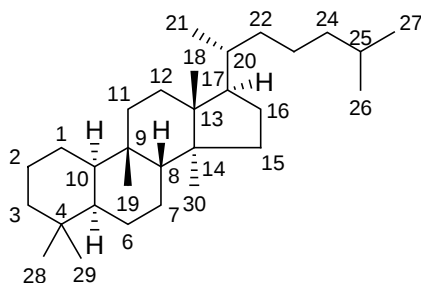


半系统命名：(23Z)-环木菠萝-23-烯-3 β -醇 ((23Z)-cycloart-23-en-3 β -ol)

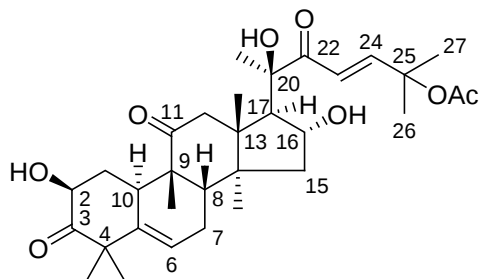
俗名：胖大海素 A ((+)-sterculin A)

8.2.5.3.7. 葫芦萜烷类 (cucurbitanes)

母体氢化物：葫芦萜烷 (cucurbitane)



例：



半系统命名：(+)-25-乙酰氧基-2 β ,16 α ,20-三羟基葫芦萜-5,23-二烯-3,11,22-三酮

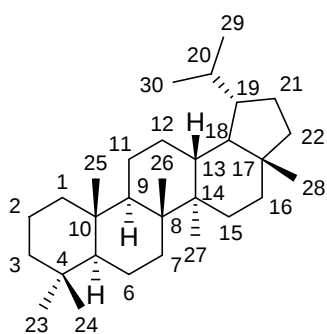
((+)-25-acetoxy-2 β ,16 α ,20-trihydroxy-cucurbita-5,23-diene-3,11,22-trione)

俗名：葫芦苦素 B (cucurbitacin B)

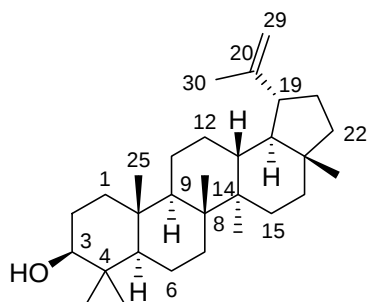
8.2.5.4. 五环三萜

8.2.5.4.1. 羽扇豆烷类 (lupanes)

母体氢化物：羽扇豆烷 (lupane)



例：

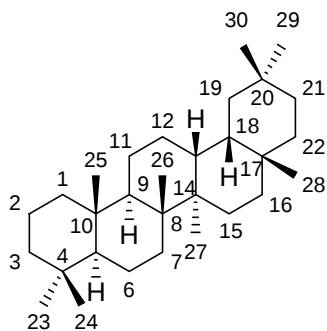


半系统命名：羽扇豆-20(29)-烯-3 β -醇 (lup-20(29)-en-3 β -ol)

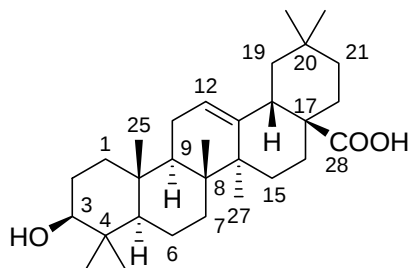
俗名：羽扇豆 (lupeol)

8.2.5.4.2. 齐墩果烷类 (oleananes, β -amyranes)

母体氢化物：齐墩果烷 (oleanane)



例：

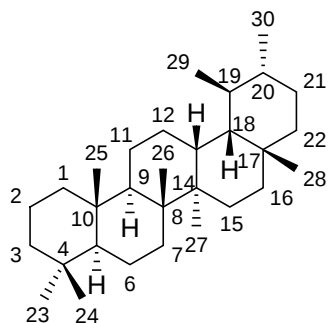


半系统命名：3 β -羟基齐墩果-12-烯-28-酸 (3 β -hydroxy-olean-12-en-28-oic acid)

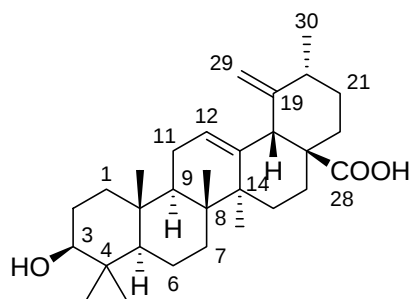
俗名：齐墩果(烷)酸 ((+)-oleanolic acid)

8.2.5.4.3. 乌索烷类 (ursanes)

母体氢化物：乌索烷 (ursane)



例：

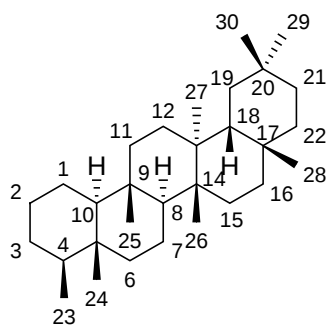


半系统命名：3β-羟基乌索-12,19(29)-二烯-28-酸 (3β-hydroxyursa-12,19(29)-dien-28-oic acid)

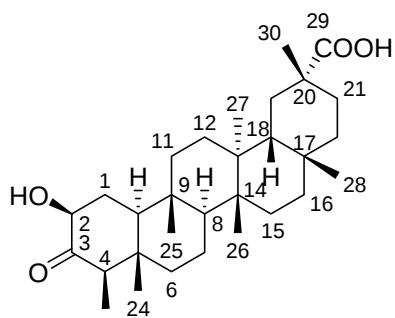
俗名：

8.2.5.4.4. 木栓烷类 (friedelanes)

母体氢化物：木栓烷 (friedelane)



例：

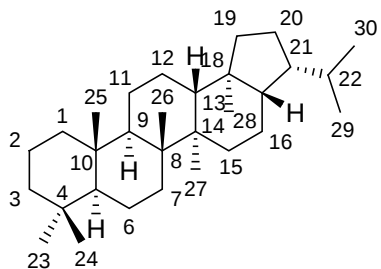


半系统命名：2 β -羟基-3-氧亚基本栓烷-29-酸（2 β -Hydroxy-3-oxo-friedelan-29-oic acid）

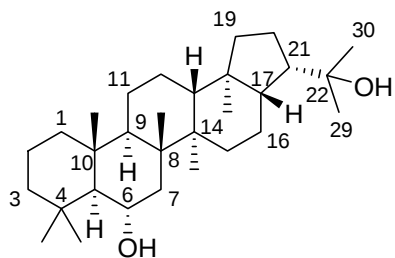
俗名：雷公藤酸 F（Wilforic acid F）

8.2.5.4.5. 何帕烷类（hopanes）

母体氢化物：何帕烷（hopane）



例：

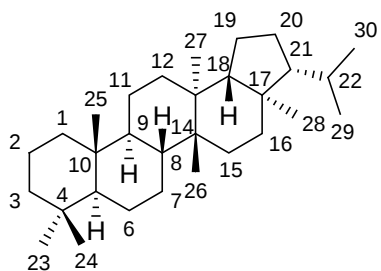


半系统命名：(+)-何帕(烷)-6 α ,22-二醇((+)-hopane-6 α ,22-diol)

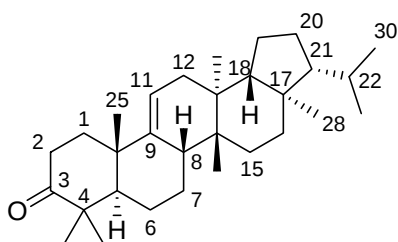
俗名：

8.2.5.4.6. 羊齿烷类（fernanes）

母体氢化物：羊齿烷（fernane）



例:

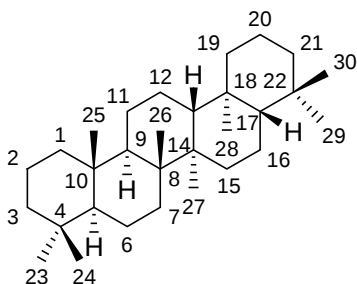


半系统命名: 羊齿-9(11)-烯-3-酮 (fern-9(11)-en-3-one)

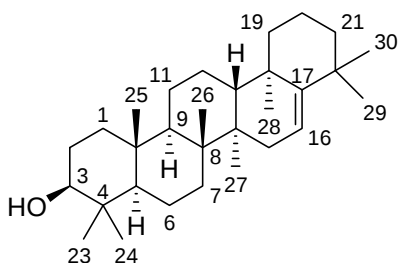
俗名: (fernenone)

8.2.5.4.7. 伽马腊烷类 (gammaceranes)

母体氢化物: 伽马腊烷 (gammacerane)



例:

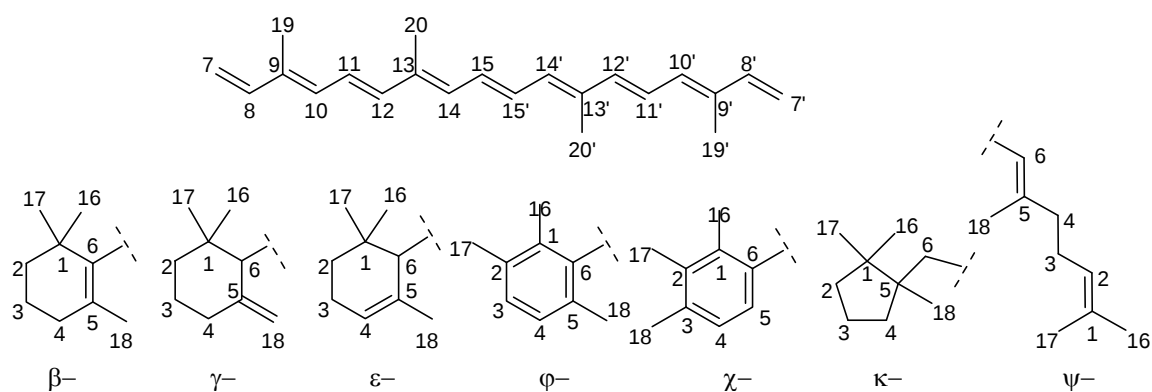


半系统命名: 伽马腊-16-烯-3β-醇 (gammacer-16-en-3β-ol)

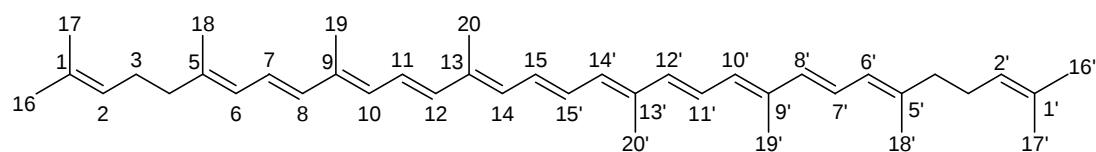
俗名:

8.2.6. 四萜 (Tetraterpene)

四萜也称胡萝卜素类化合物, 有其独特的半系统命名方法, 根据其 11 碳共轭烯链两端的端基命名各类母体氢化物, 目前已知的有 7 类端基结构, 分别用希腊字母 β -, γ -, ϵ -, ϕ -, χ -, κ -, ψ - 表示, 后接词根胡萝卜素 (carotene), 其编号系统也较独特, 由中间二碳原子为 15 和 15' 分头沿主链向外倒编。

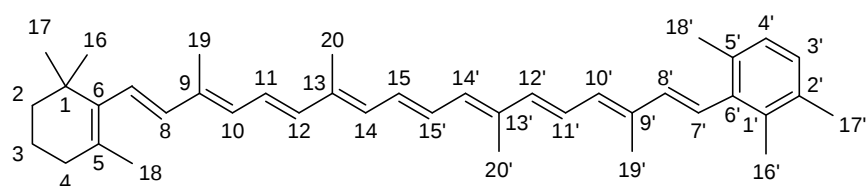


母体氢化物例：



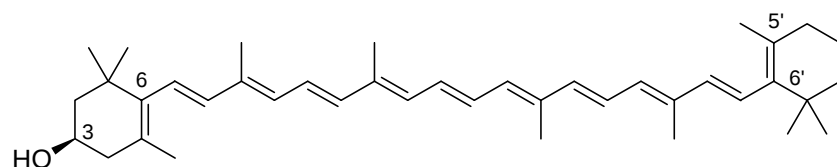
ψ,ψ-胡萝卜素 (ψ,ψ-carotene)

俗名：番茄红素 (lycopene)



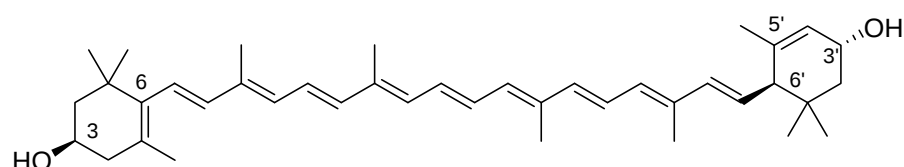
β,φ-胡萝卜素 (β,φ-carotene)

半系统命名例：



半系统命名：β,β-胡萝卜素-3β-醇 (ββ-caroten-3β-ol)

俗名：隐黄质 (cryptoxanthin)



半系统命名：(+)-β,ε-胡萝卜素-3α,3'α-二醇 ((+)-β,ε-caroten-3α,3'α-diol)

俗名：叶黄素 (lutein, xanthophylls)

参考文献

[1] IUPAC Recommendations 1999: Revised Section F: Natural Products and Related Compounds, *Pure Appl. Chem.* **1999**, 71, 587-643; Correction and Modification (2004), *Pure Appl. Chem.* **2004**, 76, 1283-1292.

萜类命名分类目录

8. 2. 萜类 (terpene)

8.2.1 单萜 (monoterpenoids)

8.2.1.1. 无环单萜 (acyclic monoterpenoids)

8.2.1.2. 单环单萜

8.2.1.2.1. 环丙烷单萜 (cyclopropane monoterpenoids)

8.2.1.2.2. 戊环并吡喃单萜 (iridoid monoterpenoids)

8.2.1.2.3. 环己碳环单萜 (cyclohexane monoterpenoid)

8.2.1.3. 二环单萜

8.2.1.3.1. 蒎烷类 (pinanes)

8.2.1.3.2. 樟烷类 (蒈烷类) (camphanes, bornanes)

8.2.1.3.3. 葑烷类 (fenchanes)

8.2.1.3.4. 薐(kai)烷类 (caranes)

8.2.1.3.5. 桉(zhu)烷类 (侧柏烷类) (thujanes)

8.2.2. 倍半萜 (sesquiterpenes)

8.2.2.1. 无环倍半萜

8.2.2.1.1. 金合欢烷类(法呢烷类) (farnesanes)

8.2.2.2. 单环倍半萜

8.2.2.2.1. 环金合欢烷类 (cyclofarnesanes)

8.2.2.2.2. 没药烷类 (bisabolanes)

8.2.2.2.3. 吉玛烷类 (germacranes)

8.2.2.2.4. 橐烷型 (elemanes)

8.2.2.2.5. 葎草烷类 (humulanes)

8.2.2.3. 二环倍半萜

8.2.2.3.1. 杜松烷类 (cadinanes)

8.2.2.3.2. 桉烷类 (eudesmanes)

8.2.2.3.3. 佛术烷类 (eremophilanes)

8.2.2.3.4. 二环金合欢烷类 (辛辣木烷类) (drimanes)

8.2.2.3.5. 苦味毒烷类 (picrotoxanes)

8.2.2.3.6. 伊鲁达烷类 (illudalanes)

8.2.2.3.7. 绿苔烷类 (pinguisanes)

8.2.2.3.8. 喜马偕尔烷类 (himachalanes)

8.2.2.3.9. 愈创木烷类 (guaianes)

8.2.2.3.10. 异胡萝卜烷类 (isodaucanes)

8.2.2.3.11. 胡萝卜烷类 (daucanes)

8.2.2.3.12. 乳菇烷类 (lactaranes)

8.2.2.3.13. 石竹烷型 (caryophyllanes)

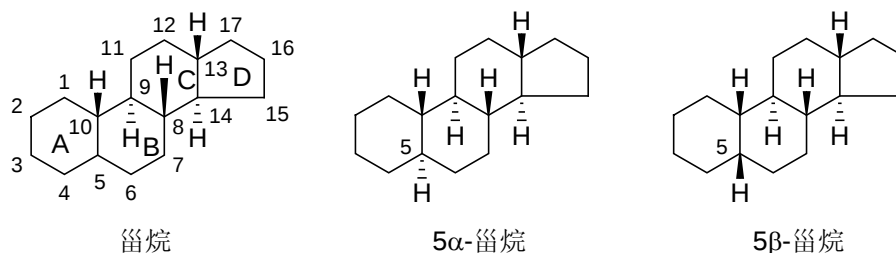
8.2.2.3.14. 菖蒲烷型 (acoranes)

- 8.2.2.3.15. 花柏烷类 (chamigranes)
- 8.2.2.3.16. 樟树烷类 (campherenanes)
- 8.2.2.3.17. β -檀香烷类 (β -santalanes)
- 8.2.2.4. 三环倍半萜
 - 8.2.2.4.1. 樱草烷类 (hirsutanes)
 - 8.2.2.4.2. 雪松烷类 (cedranes)
 - 8.2.2.4.3. 异雪松烷类 (isocedranes)
 - 8.2.2.4.4. 前深冬烷类 (prezizaanes)
 - 8.2.2.4.5. 深冬烷类 (zizaane)
 - 8.2.2.4.6. 原伊鲁烷类 (protoilludanes)
 - 8.2.2.4.7. 伊鲁烷类 (illudanes)
 - 8.2.2.4.8. 马瑞斯姆烷类 (marasmanes)
 - 8.2.2.4.9. 异乳菇烷类 (isolactaranes)
 - 8.2.2.4.10. 罗汉柏烷类 (thujopsanes)
 - 8.2.2.4.11. 马兜铃烷类 (aristolanes)
 - 8.2.2.4.12. 草澄茄烷类 (cubebanes)
 - 8.2.2.4.13. 广藿香烷类 (patchoulanes)
 - 8.2.2.4.14. 长蕨烷类 (longipinanes)
 - 8.2.2.4.15. 长叶烷类 (longifolanes)
 - 8.2.2.4.16. α -檀香烷 (α -santalanes)
- 8.2.3. 二萜 (diterpenes)
 - 8.2.3.1. 无环和单环二萜 (acyclic and monocyclic diterpenes)
 - 8.2.3.1.1. 植物烷类 (phytanes)
 - 8.2.3.1.2. 烟草烷类 (cembranes)
 - 8.2.3.2. 双环二萜
 - 8.2.3.2.1. 半日花烷类 (labdanes)
 - 8.2.3.2.2. 克罗烷类 (clerodanes)
 - 8.2.3.2.3. 西松烷类 (casbanes)
 - 8.2.3.2.4. 海兔烷类 (dolabellanes)
 - 8.2.3.2.5. 假白榄烷类 (jatrophanes)
 - 8.2.3.3. 三环二萜
 - 8.2.3.3.1. 松香烷类 (abietanes)
 - 8.2.3.3.2. 海松烷类 (pimaranes)
 - 8.2.3.3.3. 罗汉松烷类 (podocarpanes)
 - 8.2.3.3.4. 玫瑰烷类 (rosanes)
 - 8.2.3.3.5. 桃拓烷类 (totaranes)
 - 8.2.3.3.6. 卡山烷类 (cassanes)
 - 8.2.3.3.7. 瑞香烷类 (daphnanes)
 - 8.2.3.3.8. 紫杉烷类 (taxanes)
 - 8.2.3.4. 四环二萜
 - 8.2.3.4.1. 贝壳杉烷类 (kauranes)
 - 8.2.3.4.2. 贝叶烷类 (beyeranes)
 - 8.2.3.4.3. 阿替生烷类 (atisane)
 - 8.2.3.4.4. 巴豆烷类 (tigliananes)

- 8.2.3.4.5. 巨大戟烷类 (ingenanes)
- 8.2.3.4.6. 木藜芦毒烷类 (grayanotoxanes)
- 8.2.3.4.7. 赤霉烷类 (gibberellanes)
- 8.2.3.4.8. 异戊烯基倍半萜类二萜
- 8.2.4. 二倍半萜 (sesterterpenes)
- 8.2.5. 三萜 (triterpenes)
 - 8.2.5.1. 无环三萜
 - 8.2.5.2. 单环、二环和三环三萜
 - 8.2.5.2.1. 鸢尾醛类 (iridals) 三萜
 - 8.2.5.2.2. 龙涎香烷类 (ambranes) 三萜
 - 8.2.5.3. 甾烷类 (gonanes) 四环三萜
 - 8.2.5.3.1. 原萜烷类 (protostanes)
 - 8.2.5.3.2. 达玛烷类 (dammaranes)
 - 8.2.5.3.3. 大戟烷类 (euphanes)
 - 8.2.5.3.4. 变构甘遂烷类 (apotirucallanes)
 - 8.2.5.3.5. 羊毛甾烷类 (lanostanes)
 - 8.2.5.3.6. 环木菠萝烷类 (cycloartanes)
 - 8.2.5.3.7. 葫芦萜烷类 (cucurbitanes)
 - 8.2.5.4. 五环三萜
 - 8.2.5.4.1. 羽扇豆烷类 (lupanes)
 - 8.2.5.4.2. 齐墩果烷类 (oleananes, β -amyrans)
 - 8.2.5.4.3. 乌索烷类 (ursanes)
 - 8.2.5.4.4. 木栓烷类 (friedelanes)
 - 8.2.5.4.5. 何帕烷类 (hopanes)
 - 8.2.5.4.6. 羊齿烷类 (fernanes)
 - 8.2.5.4.7. 伽马腊烷类 (gammaceranes)
- 8.2.6. 四萜 (Tetraterpene) 胡萝卜素类 (carotenes)

8.3. 甾体 (steroid) [1]

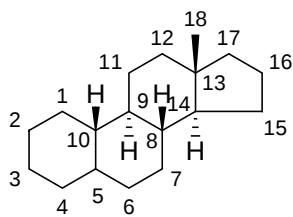
甾体化合物母体氢化物的基本骨架是全氢化的戊环并[α]菲的甾烷 (gonane)，一个由 6/6/6/5 员组成的 A/B/C/D 四环体系。各种不同结构类型甾体化合物的分类主要取决于此甾烷骨架 10 位、13 位上甲基的有无和 17 位上碳链的长短和带有的取代基及其结构状态。甾烷的编号体系和立体构型见下结构式，其中 5-位的氢处于平面上的称 5 β -甾烷，在下者称 5 α -甾烷。



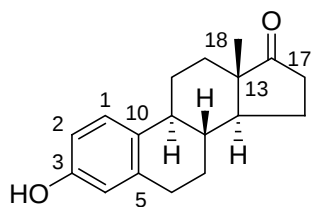
由甾烷衍生得各类母体氢化物、官能性母体和其半系统命名见以下各节。由各类甾体母体氢化物和官能性母体衍生化合物的半系统命名按前述命名通则进行，其立体化学的标识在四环环上者采用 α , β 位表达取代基其与角甲基相反或相同侧的相对构型 (参见 7.3.1 节)；在边链上者则仍按一般的 R/S 体系规则进行，废止 1980 版的 α/β 标识方法。

8.3.1. 雌甾烷类

母体氢化物：雌甾烷 (estrane)



例：

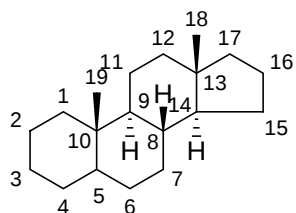


半系统名：3-羟基雌甾-1,3,5(10)-三烯-17-酮 (3-hydroxyestra-1,3,5(10)-trien-17-one)

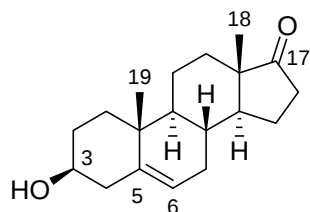
俗名：雌酮 (estrone)

8.3.2. 雄甾烷类

母体氢化物：雄甾烷 (androstane)



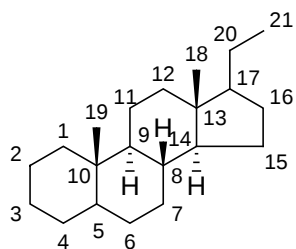
例：



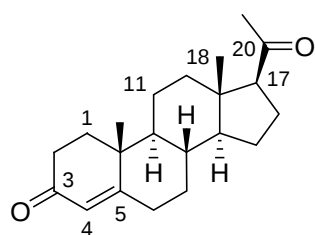
半系统名：3β-羟基雄甾-5-烯-17-酮 (3β-hydroxyandrost-5-en-17-one)

8.3.3. 孕甾烷类

母体氢化物：孕甾烷 (pregnane)



例：

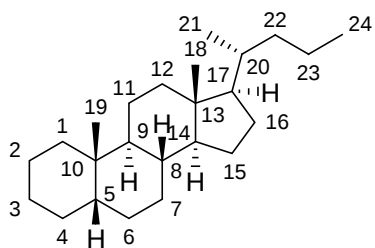


半系统名：孕甾-4-烯-3,20-二酮 (pregn-4-en-3,20-dione)

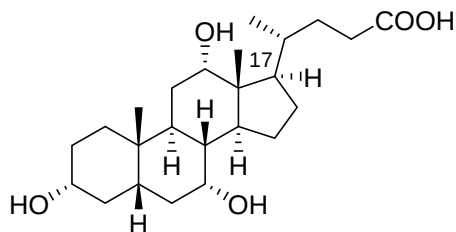
俗名：黄体酮 (progesterone)

8.3.4. 胆酸烷类

母体氢化物：胆(酸)烷 (cholane)



例:



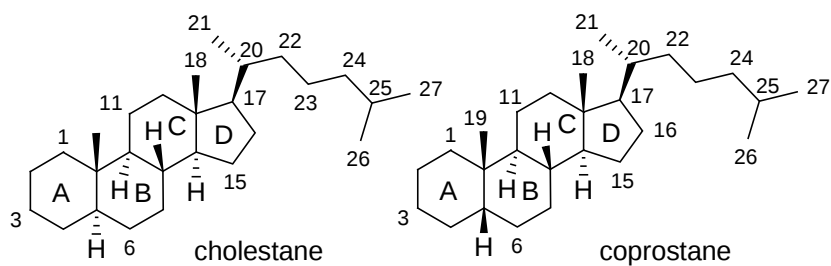
半系统名: $3\alpha,7\alpha,12\alpha$ -三羟基-胆-24-酸 ($3\alpha,7\alpha,12\alpha$ -trihydroxy-cholan-24-oic acid)

俗名: 胆酸, 牛胆酸 (cholic acid)

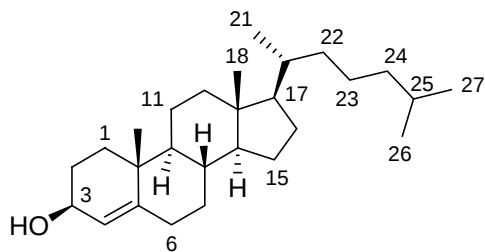
8.3.5. 其它 C-17 位不同碳链甾体类型

(1) 胆甾烷类和粪甾烷类

母体氢化物: 胆甾烷 (cholestane) 和粪甾烷 (coprostane)

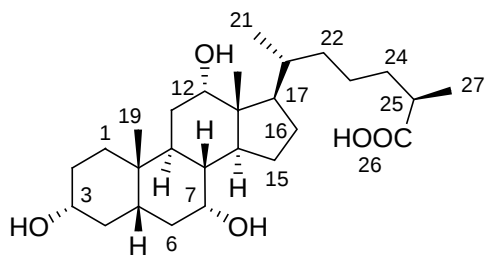


例:



半系统名: 胆甾-5-烯-3 β -醇 (cholest-5-en-3 β -ol)

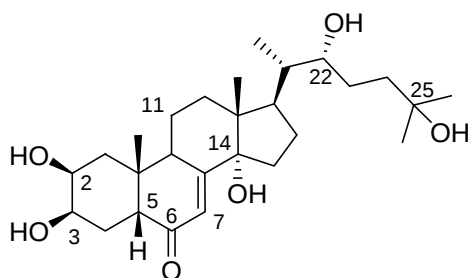
俗名: 胆固醇 (cholesterol)



半系统名：(25*R*)-3 α ,7 α ,12 α -三羟基-粪甾-26-酸

（(25*R*)-3 α ,7 α ,12 α -trihydroxy-coprostan-26-oic acid）或 (25*R*)-3 α ,7 α ,12 α -三羟基-5 β -胆甾-26-酸（(25*R*)-3 α ,7 α ,12 α -trihydroxy-5 β -cholestan-26-oic acid）

俗名：三羟基粪甾烷酸（trihydroxycoprostanoic acid）



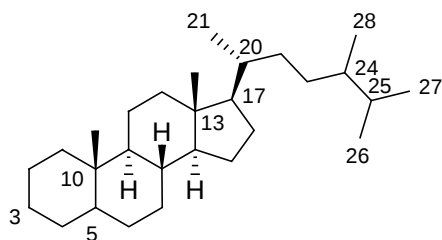
半系统名：2 β ,3 β ,14,22*R*,25-五羟基-5 β -胆甾-7-烯-6-酮

（2 β ,3 β ,14,22*R*,25-pentahydroxy-5 β -cholest-7-en-6-one）

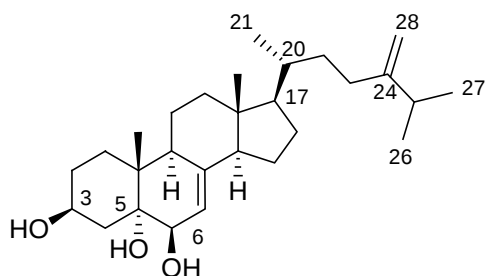
俗名：蜕皮酮（ecdysone）

（2）麦角甾烷类

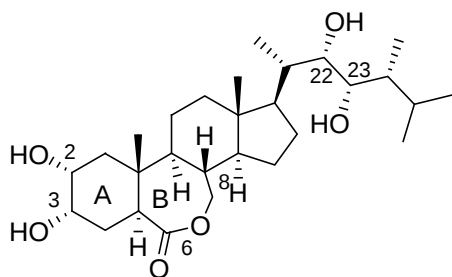
母体氢化物：麦角甾烷（ergostane）



例：

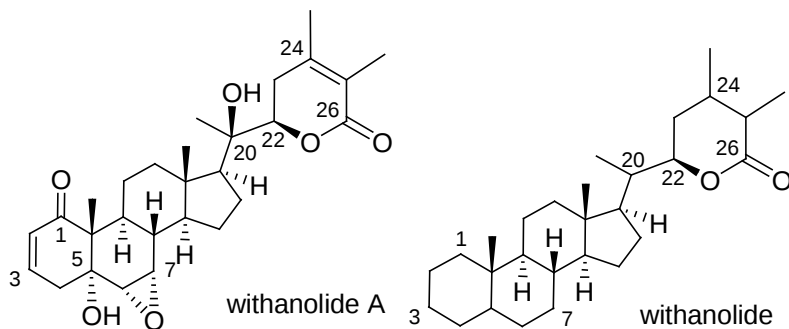


半系统名：麦角甾-7,24(28)-二烯-3 β ,5 α ,6 β -三醇（ergosta-7,24(28)-diene-3 β ,5 α ,6 β -triol）



半系统名：2 α ,3 α ,22S,23S-四羟基-B-增-7-氧杂-5 α -麦角甾-6-酮

(2 α ,3 α ,22S,23S-tetrahydroxy-B-homo-7-oxa-5 α -ergostan-6-one)



半系统名：6 α ,7 α -氧桥-5 α ,20R,22R-三羟基-1-氧亚基-麦角甾-2,24-二烯酸- δ -内酯

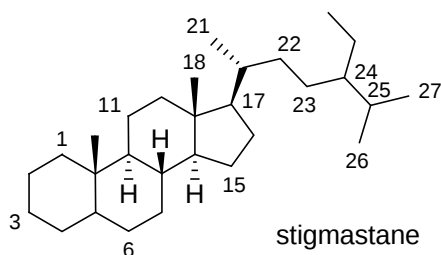
(6 α ,7 α -epoxy-5 α ,20R,22R-trihydroxy-1-oxo-ergosta-2,24-dien-26-oic acid, δ -lactone)

注：在睡茄内酯类天然产物中有以俗名睡茄内酯（withanolide）为官能性母体进行半系统命名，则此时可命名为：6 α ,7 α -氧桥-5 α ,20R,22R-三羟基-1-氧亚基-睡茄-2,24-二烯内酯（6 α ,7 α -epoxy-5 α ,20R,22R-trihydroxy-1-oxo-witha-2,24-dienolide）

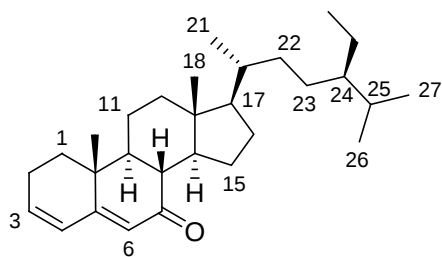
俗名：睡茄内酯A（withanolide A）

(3) 豆甾烷类

母体氢化物：豆甾烷（stigmastane）



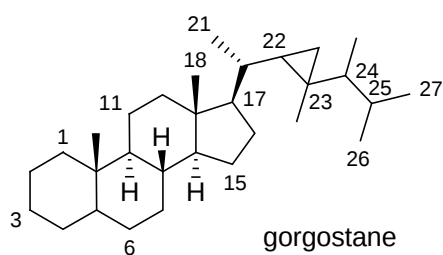
例：



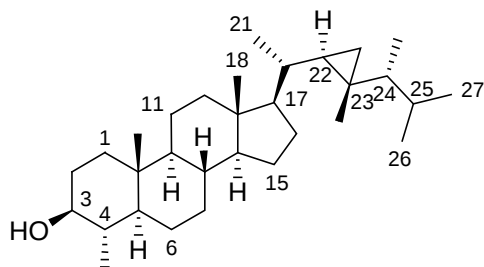
半系统名: (24*R*)-豆甾-3,5-二烯-7-酮
((24*R*)-stigmast-3,5-dien-7-one)

(4) 珊瑚甾烷类

母体氢化物: 珊瑚甾烷 (gorgostane)



例:

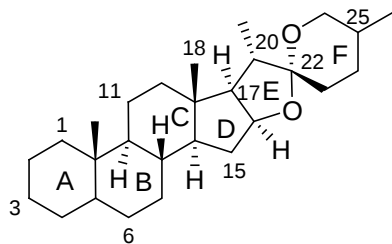


半系统名: (5 α ,22*R*,23*R*,24*R*)- 4 α -甲基-珊瑚甾-3 β -醇
((5 α ,22*R*,23*R*,24*R*)- 4 α -methyl-gorgostan-3 β -ol)

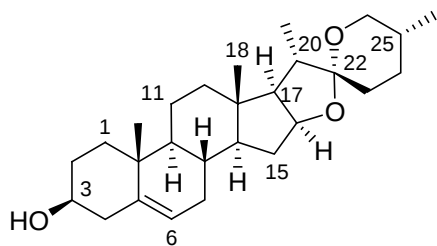
8.3.6. C-17位连杂环边链的甾体类型

(1) 螺甾烷类

母体氢化物: 螺甾烷 (spirostane)



例:

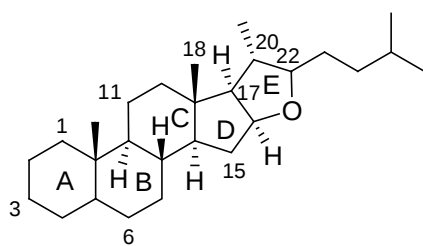


半系统名：(25*R*)-螺甾-5-烯-3 β -醇 ((25*R*)-spirost-5-en-3 β -ol)

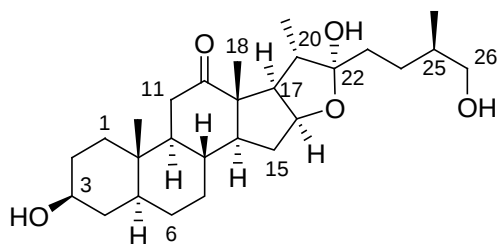
俗名：薯蓣皂苷元，薯蓣皂素 (diosgenin)

(2) 呋甾烷类

母体氢化物：呋甾烷 (furostane)



例：

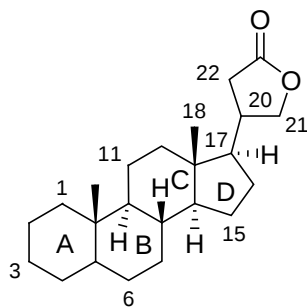


半系统名：(5 α ,25*R*)-3 β ,22 α ,26-三羟基-呋甾-12-酮

((5 α ,25*R*)-3 β ,22 α ,26-trihydroxy-furostan-12-one)

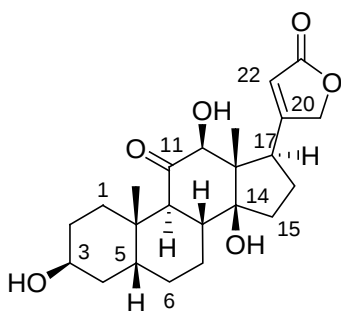
(3) 心甾内酯类

官能性母体：心甾内酯 (cardenolide)



采用官能性母体时的命名法。

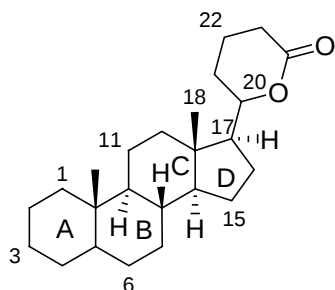
例：



半系统名：(5 β)-3 β ,12 β ,14 β -三羟基-11-氧亚基-心甾-20(22)-烯内酯
 ((5 β)-3 β ,12 β ,14 β -trihydroxy-11-oxo-card-20(22)-enolide)

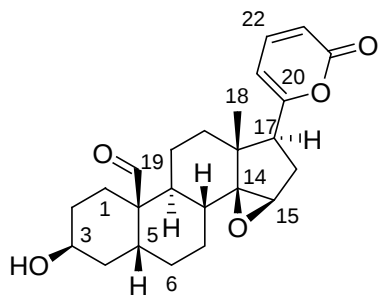
(4) 蟾甾内酯类

官能性母体：蟾甾内酯 (bufanolide)



采用官能性母体时的命名法。

例：



半系统名：(5 β)-14 β ,15 β -氧桥-3 β -羟基-19-氧亚基-蟾甾-20,22-二烯内酯
 ((5 β)-14 β ,15 β -epoxy-3 β -hydroxy-19-oxo-bufa-20,22-dienolide)

俗名：脂蟾毒精 (resibufagin)

[1] IUPAC and IUB Joint commission on biochemical nomenclature, Recommendations 1989: Nomenclature of Steroid, *Pure Appl. Chem.* **1989**, 61, 1783-1822.

8.4. 糖 (Carbohydrate)

糖又称为碳水化合物 (Carbohydrate) 是因为最初发现的单糖的分子式为 $[C_m(H_2O)_n]$, 好像糖是由碳和水构成的。尽管这一称呼有一定的缺陷, 但碳水化合物 (Carbohydrate) 这一术语现在还广泛使用。

“碳水化合物 (Carbohydrate)” 包括单糖、寡糖、多糖, 同时也包含单糖羰基还原产物(糖醇)、糖的一个或多个羟基被氧化的衍生物以及由氨基、巯基或类似杂原子官能团替换糖中一个或多个羟基所形成的衍生物。

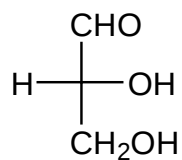
8.4.1 糖命名的基本规则

单糖的命名多采用俗名; 单糖的构型是用位次最高的手性中心的构型标示, 其构型采用相对构型表示法分为 D 或者 L 构型; 消旋体用前缀 DL-来表示, 内消旋体用前缀 “meso”来表示; 糖的旋光性, 可在构型前缀前使用(+)-、(-)-或(±)-标示; 糖的环状结构的端基构型用 α 或 β 标示, α 异构体是指端基中心上的环外氧原子与构型标示原子上的氧原子在Fischer投影式中呈顺式 (cis) 的异构体; β 异构体是呈反式 (trans) 的异构体; 端基异构体符号 α 或 β 写在糖构型符号 D 或 L 之前, 之间用短线连接。而寡糖、多糖以及糖衍生物采用单糖俗名加半系统命名的方法命名。

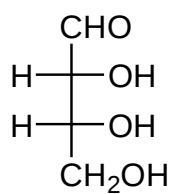
8.4.2. 链状单糖 (monosaccharide)的命名

“单糖”是指含有一个单独(糖)单元, 不与其它类似单元存在苷键连接的化合物; 从功能团去分析, 单糖母体是含有 3 个或 3 个以上碳原子的多羟基醛 $H-[CHOH]_n-CHO$ 或多羟基酮 $H-[CHOH]_n-CO-[CHOH]_m-H$, 个别糖还有氨基。它包括醛糖、二醛糖、醛酮糖、酮糖、二酮糖、去氧糖、氨基糖以及它们的衍生物。

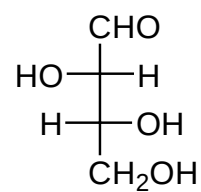
8.4.2.1. **单糖的命名**是依据母体单糖的开链结构名称来命名的。单糖母体可以采用系统命名, 根据糖的碳原子数命名为三碳糖 (丙糖)、四碳糖 (丁糖)、五碳糖 (戊糖)、六碳糖 (己糖)等, 糖的构型则用俗名的前缀标示, 如: D-葡萄糖-己糖(D-Gluco-hexose); 相比于糖的系统命名, 糖的俗名更常用, C3-C6 的糖多有俗名。图 8-4-1 和 8-4-2 给出了不多于六个碳原子的 D-构型母体醛糖与酮糖的结构、俗名和三字母缩写。



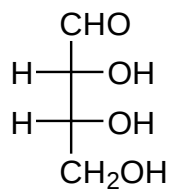
2, 3-二羟基丙醛
(D-甘油醛)
2,3-Dihydroxy propanal
(D-Glyceraldehyde)



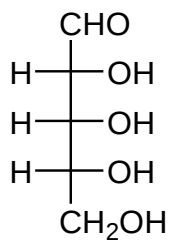
D-赤-丁糖
(D-赤藓糖)
D-erythro-Tetrose
(D-Erythrose)



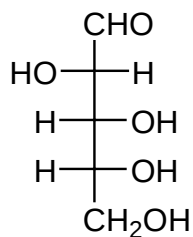
D-苏-丁糖
(D-苏阿糖)
D-threo-Tetrose
(D-Threose)



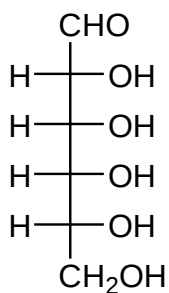
D-赤-丁糖
(D-赤藓糖)
D-erythro-Tetrose
(D-Erythrose)



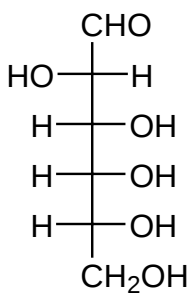
D-核-戊糖
(D-核糖)
D-ribo-Pentose
(D-Ribose; D-Rib)



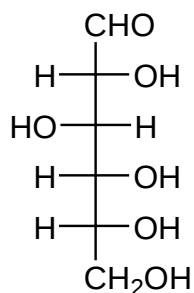
D-阿拉伯-戊糖
(D-阿拉伯糖)
D-Arabino-Pentose
(D-Arabinose; D-Ara)



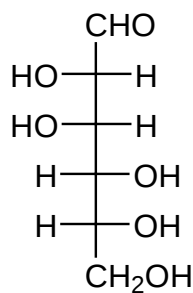
D-阿洛-己糖
(D-阿洛糖)
D-allo-Hexose
(D-Allose;
D-All)



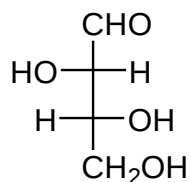
D-阿卓-己糖
(D-阿卓糖)
D-altro-Hexose
(D-Altrose;
D-Alt)



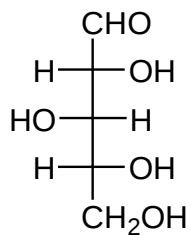
D-葡萄-己糖
(D-葡萄糖)
D-gluco-Hexose
(D-Glucose;
D-Glc)



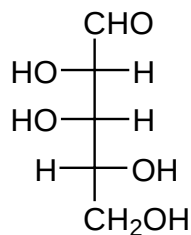
D-甘露-己糖
(D-甘露糖)
D-manno-Hexose
(D-Mannose;
D-Man)



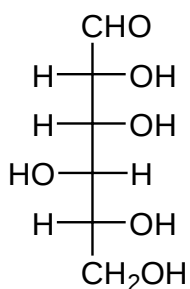
D-苏-丁糖
(D-苏阿糖)
D-threo-Tetrose
(D-Threose)



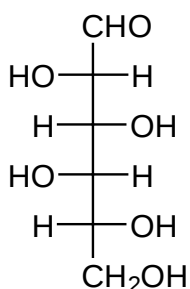
D-木-戊糖
(D-木糖)
D-xylo-Pentose
(D-Xylose; D-Xyl)



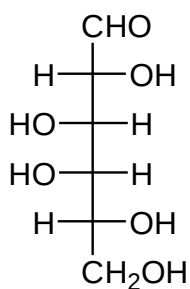
D-来苏-戊糖
(D-来苏糖)
D-lyxo-Pentose
(D-Lyxose; D-Lyx)



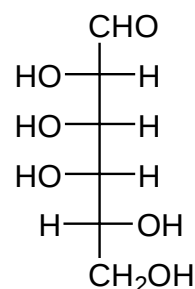
D-古洛-己糖
(D-古洛糖)
D-gulo-Hexose
(D-Gulose;
D-Gul)



D-艾杜-己糖
(D-艾杜糖)
D-ido-Hexose
(D-Idose;
D-Ido)



D-半乳-己糖
(D-半乳糖)
D-galacto-Hexose
(D-Galactose;
D-Gal)



D-塔罗-己糖
(D-塔洛糖)
D-talo-Hexose
(D-Talose;
D-Tal)

图 8-4-1. 含有 3 到 6 个碳原子 D-醛糖的结构、系统名称、俗名及三字母缩写

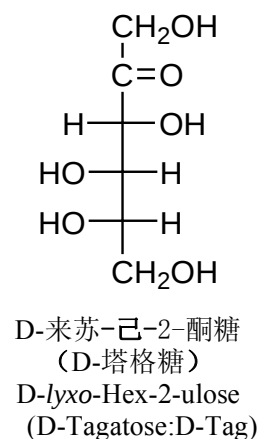
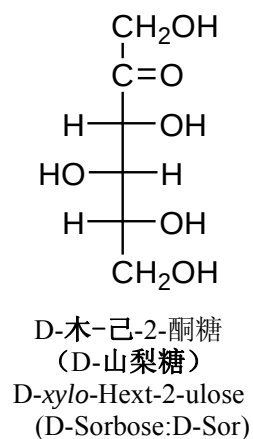
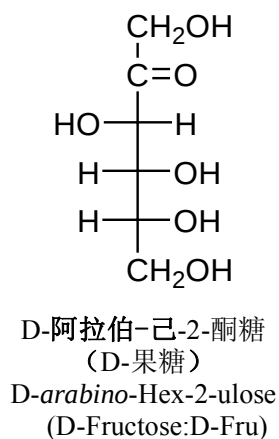
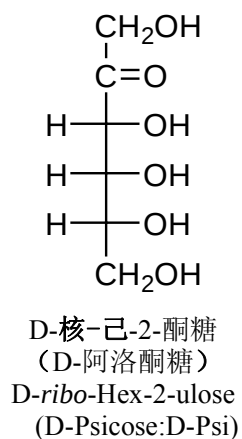
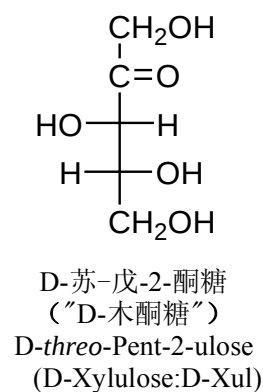
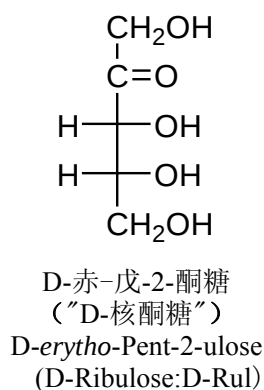
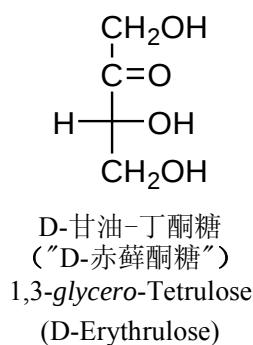
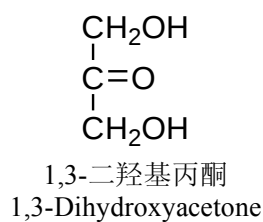


图 8-4-2. 含有3到6个碳原子的D- 2-酮糖的结构、系统名称、俗名及三字母缩写

8.4.2.2. 高碳糖的命名

对于含有多于四个手性中心的醛糖、酮糖，在命名时应在主干词前添加两个或更多的构型前缀。最先书写的应该是离C-1最远的部分 (可能少于4个原子)，糖的构型取决于编号最高的手性碳的构型。

例如：

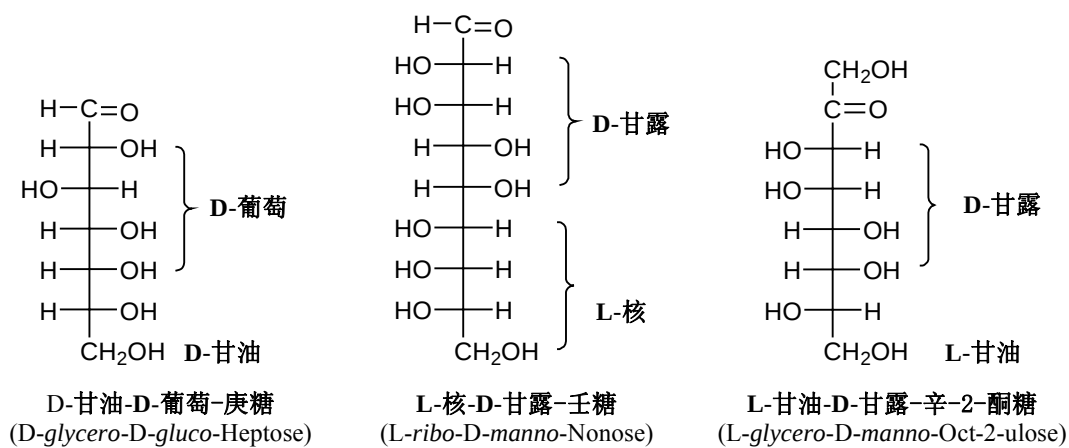
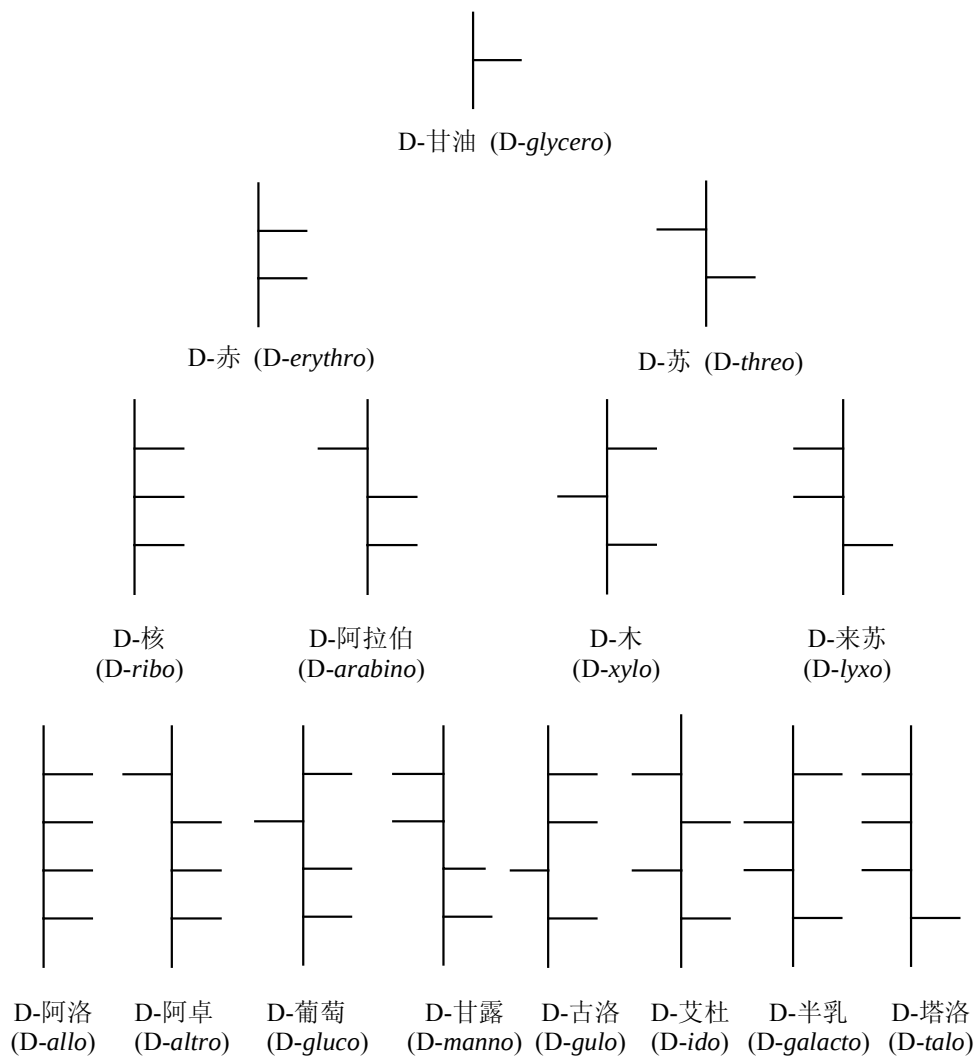


图 8-4-3. 列出了常见的D-及L-构型糖型结构及对应的词头。



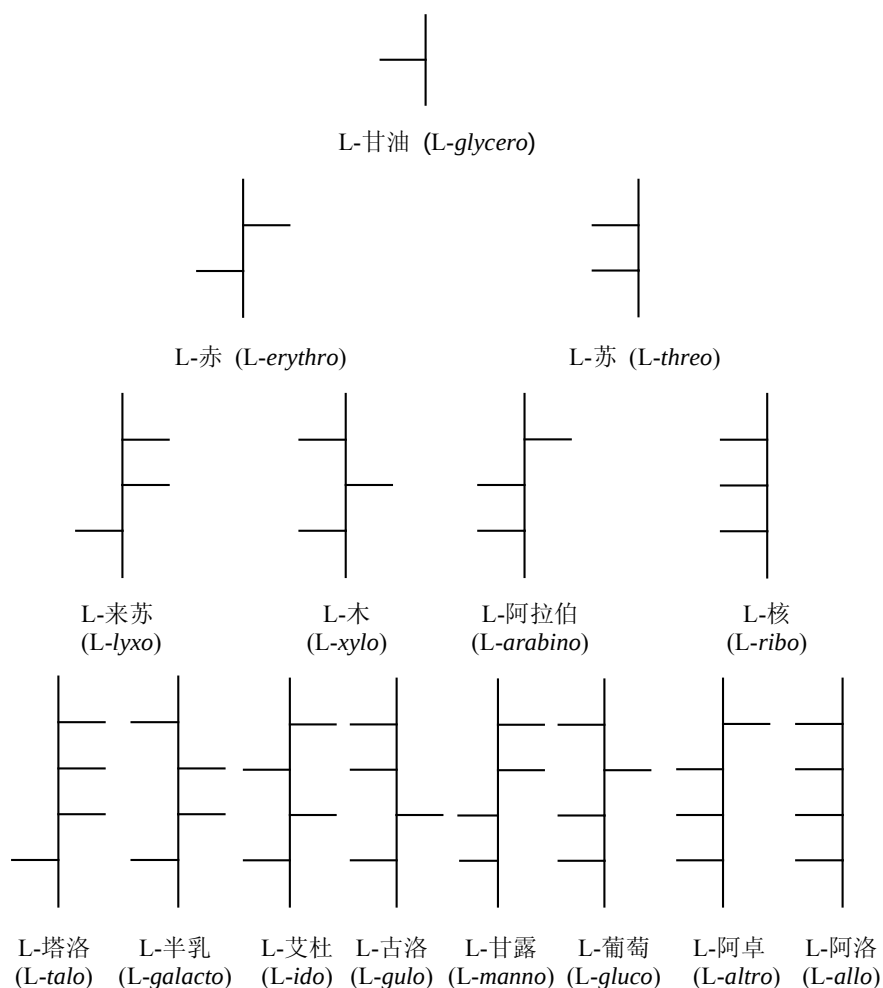


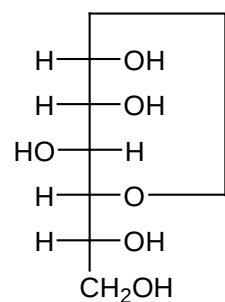
图 8-4-3. 常见D-及L-构型糖型结构及对应的词头

8.4.3. 环状单糖的命名

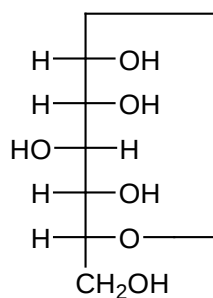
大多数的单糖以五元环、六元环环状半缩醛或半缩酮的形式存在。五元环状半缩醛或半缩酮糖称为呋喃糖；六元环的则称为吡喃糖。由闭环所形成的新手性中心称为端基中心，两个立体异构体称为端基异构体，并根据端基中心环外羟基与标示构型羟基的关系用 α 或 β 标示。 α 异构体是指端基中心上的环外氧原子与构型标示原子上的氧原子在 Fischer 投影式中呈顺式 (*cis*) 的异构体； β 异构体是呈反式 (*trans*) 的异构体，标示端基异构体符号 α 或 β 用连接号写在标示构型的符号 D 或 L 之前。

8.4.3.1. 环状结构的 Fischer 投影式表示法

如果要用 Fischer 投影式来表示一个环型糖，可以用一根长键连接具体的醇羟基与端基碳。



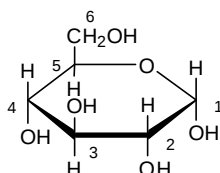
α -D-呋喃葡萄糖
(α -D-Glucofuranose)



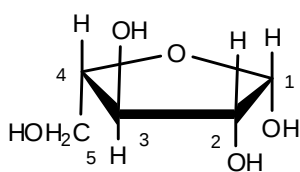
α -D-吡喃葡萄糖
(α -D-Glucopyranose)

8.4.3.2. 环状结构的 Haworth 表示法

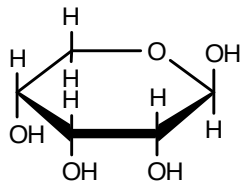
将吡喃糖写成六元环的形状，环与纸面近乎垂直，观察时从正上方垂直向下看，使环上氧在后方，C-1 在右侧，因此离观察者近的一边应位于远的一侧的下方。为更清晰标示透视的情况，离观察者近的一侧的键通常加粗。在 Fisher 投影式中朝右的基团在 Haworth 透视式中在环平面以下；左侧的则在平面以上。



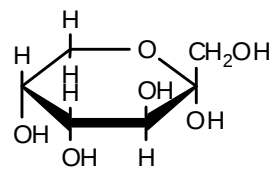
α -D-吡喃葡萄糖的 Haworth 表示法



β -L-呋喃阿拉伯糖
(β -L-Arabinofuranose)

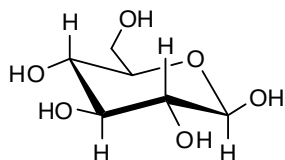


β -D-吡喃核糖
(β -D-Ribopyranose)

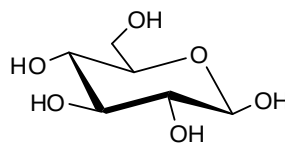


α -D-吡喃果糖
(α -D-Fructopyranose)

Haworth 式的六元环并非一个平面，而是如环己烷一样呈椅式构象存在。为了清晰标示吡喃糖的构象，Haworth 式写成椅式构象，碳上的氢原子时常被省略。



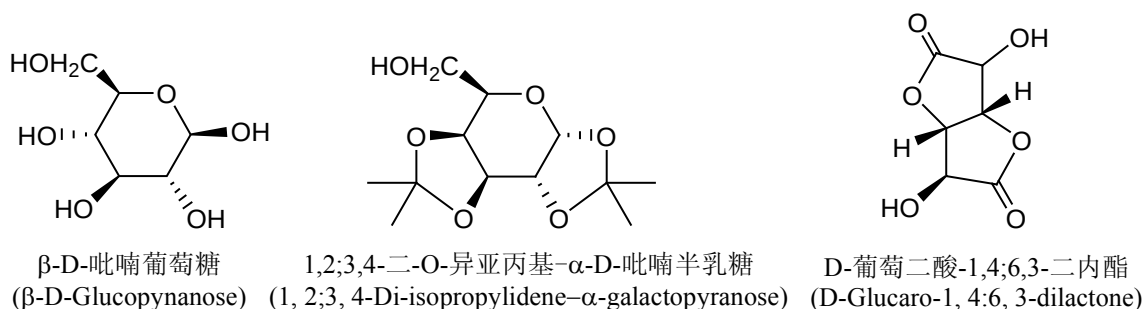
β -D-吡喃葡萄糖的椅式构象



8.4.3.3. 环状结构的 Mills 表示法

单糖的环状结构也可用 Mills 写法，特别是当出现额外的环结构时，结构式采用 Mills 式更清晰。Mills 式的表示法是将主要的半缩醛环画在纸平面上，虚线键所连取代基表

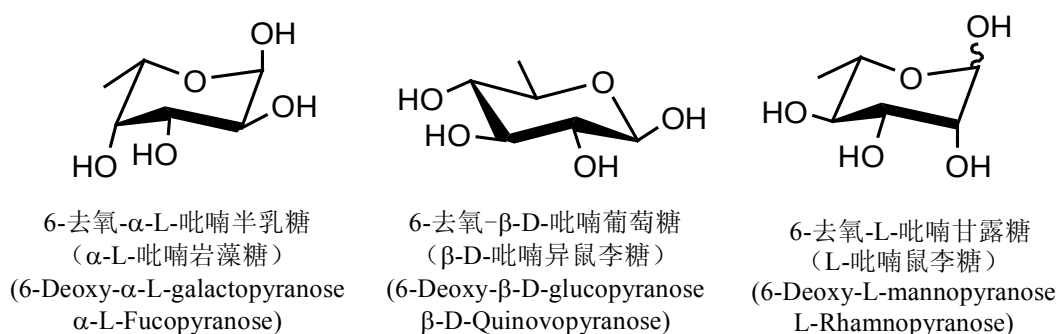
示指向纸平面里的基团，加粗键所连的基团则指向纸平面以外。



8.4.4. 单糖衍生物的命名

8.4.4.1. 去氧糖 (Deoxy sugars)命名

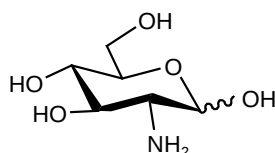
去氧糖是指糖上的一个或多个羟基的氧原子脱除的化合物。命名时用数字标示脱氧的位置，数字后用“去氧-”词缀命名。多数去氧糖有俗名，例如：岩藻糖(Fuc)，异鼠李糖 (Qui) 以及鼠李糖 (Rha)。



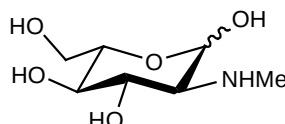
8.4.4.2. 氨基糖的命名

氨基糖是指单糖或单糖衍生物的醇羟基被氨基取代的糖，通常也被认为是去氧单糖的氢原子被氨基取代的糖，化合物的命名通常使用“脱氧(deoxy-)”和“氨基(amino-)”结合的前缀；

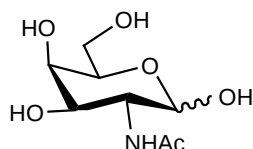
当氨基处于端基位置时，化合物命名为糖胺。



2-脱氧-2-氨基-D-吡喃葡萄糖
(2-Amino-2-deoxy-D-glucopyranose)



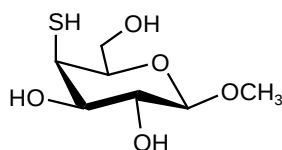
2-脱氧-2-甲氨基-吡喃葡萄糖
(2-Deoxy-2-methylamino-L-glucopyranose)



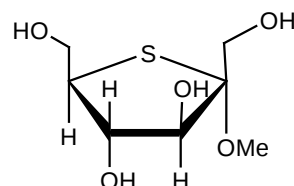
2-脱氧-2-乙酰氨基-D-吡喃半乳糖
(2-Acetamido-2-deoxy-D-galactopyranose)

8.4.4.3. 硫代糖的命名

硫代糖是指用硫原子取代醛糖及酮糖的羟基氧原子或者非环状醛糖及酮糖的羰基氧原子，这一类糖的命名在糖名称前加前缀“硫代”，“代”字通常省略。



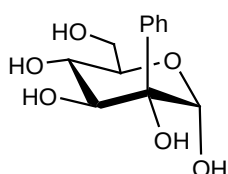
甲基 4-硫-β-D-吡喃半乳糖苷
(Methyl 4-thio-β-D-galactopyranoside)



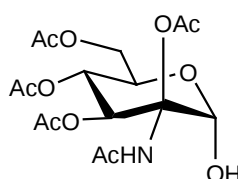
甲基 5-S-α-D-呋喃果糖苷
(Methyl 5-thio-α-D-fructofuranoside)

8.4.4.4. 其它取代单糖的命名

非端基碳上的氢原子被取代的化合物命名为 C-取代基糖。

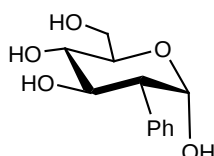


2-C-苯基-α-D-吡喃葡萄糖
(2-C-Phenyl-α-D-glucopyranose)

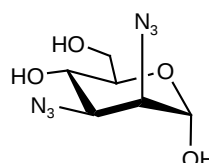


2-C-乙酰氨基-2,3,4,6-四-O-乙酰基-α-D-吡喃甘露糖
(2-C-Acetamido-2,3,4,6-tetra-O-acetyl-α-D-mannopyranose)

非端基碳原子上的-OH 被取代化合物的命名是在糖名称前加前缀“脱氧”，取代基前可加“C”也可不加。

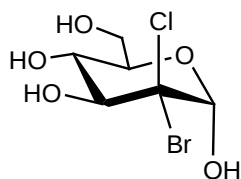


2-(C)-苯基-2-脱氧-α-D-吡喃葡萄糖
(2-(C)-phenyl-2-deoxy-α-D-glucopyranose)



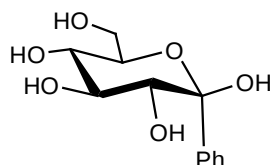
2,3-二叠氮-2,3-二脱氧-α-D-吡喃甘露糖
(2,3-Diazido-2,3-dideoxy-α-D-mannopyranose)

非端基碳原子上的不对称取代的化合物按脱氧糖的双取代命名。若产生新的手性中心，用 R, S 标示立体中心碳原子的构型。



(2R)-2-氯-2-溴-2-脱氧- α -D-吡喃葡萄糖
((2R) 2-Bromo-2-chloro-2-deoxy- α -D-glucopyranose)

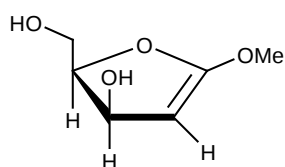
端基氢被取代的糖是在取代基前加“C”前缀命名。



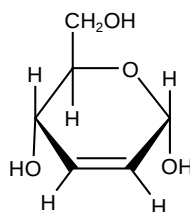
1-C-苯基- β -D-吡喃葡萄糖
(1-C-Phenyl- β -D-glucopyranose)

8.4.4.5 不饱和糖的命名

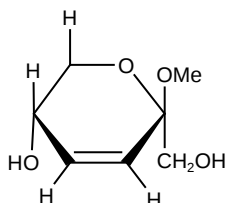
不饱和单糖是指碳骨架上相邻两个碳原子之间形成双键或三键的单糖衍生物。碳骨架上有双键的单糖衍生物命名为烯糖，在烯糖前用双键所在位置数字中较小的数字表示双键的位置，除 1 位外前面用“脱氧”表示。端基碳以外碳的构型用类似于高碳糖命名时用的构型前缀标示。



2-脱氧-1-烯-D-苏-呋喃戊糖甲苷
(Methyl 2-deoxy-D-*threo*-pent-1-enofuranoside)



2,3-二脱氧-2-烯- α -D-赤-吡喃己糖

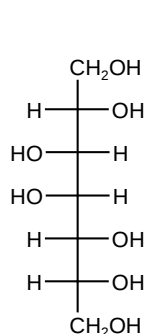


甲基 3,4-二脱氧-3-烯- β -D-甘油-2-吡喃己酮糖苷
(Methyl 3,4-dideoxy- β -D-*glycero*-hex-3-en-2-ulopyranoside)

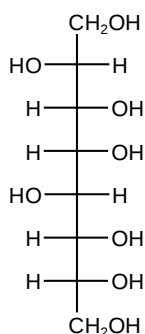
8.4.4.6. 糖醇命名

糖醇是指醛糖、酮糖的羰基还原产物，醛糖还原得到一种糖醇，而酮糖还原得到两种糖醇，可根据碳原子数命名为相应的糖醇。当糖醇可有几种命名时，优先命名为 D 型

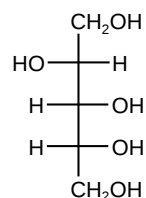
糖醇。若内消旋糖醇则用“*meso*”词头标示。



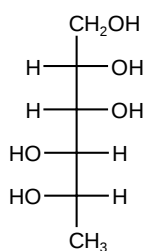
D-甘油-D-半乳-庚糖醇
(*D-glycero-D-galacto-Heptitol*)



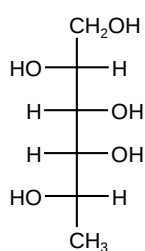
D-赤-L-半乳-辛糖醇
(*D-erythro-L-galacto-Octitol*)



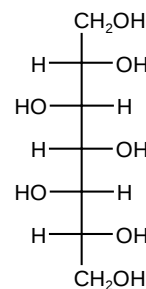
D-阿拉伯糖醇
(*D-Arabinotol*)



L-鼠李糖醇
(*L-Rhamnitol*)



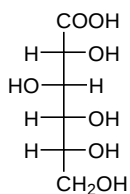
L-岩藻糖醇
(*L-Fucitol (L-Fuc-ol)*)



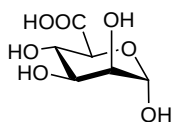
meso-D-甘油-L-艾杜-庚糖醇
(*meso-D-glycero-L-ido-Heptitol*)

8.4.4.7. 糖酸或糖醛酸命名

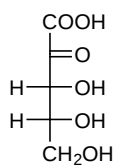
糖酸是指糖的醛基氧化为羧基的衍生物；糖醛酸是指糖的末端羟甲基氧化为羧基的产物，该类型化合物命名是将醛糖的系统命名或俗名的后缀“糖”改为“糖酸”或“糖醛酸”。



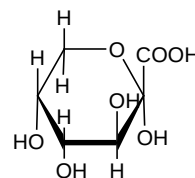
D-葡萄糖酸
D-Gluconic acid



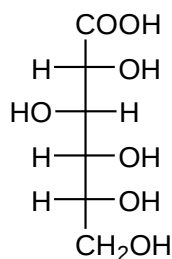
α -D-吡喃甘露糖醛酸
 α -D-Mannopyranuronic acid



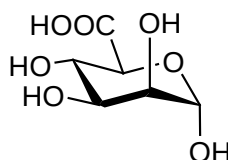
D-赤-戊-2-酮糖酸
D-erythro-Pent-2-ulosonic acid



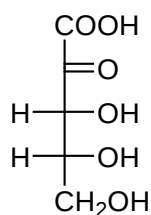
α -D-阿拉伯-己-2-吡喃酮糖酸
 α -D-arabino-Hex-2-ulopyranosonic acid



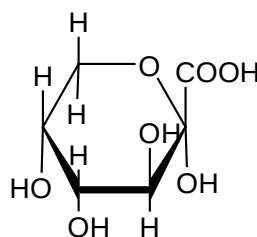
D-葡萄糖酸
(*D-Gluconic acid*)



α -D-吡喃甘露糖醛酸
(*α -D-Mannopyranuronic acid*)



D-赤-戊-2-酮糖酸
(D-erythro-Pent-2-ulonic acid)



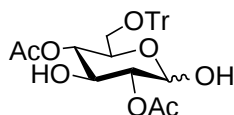
α -D-阿拉伯-己-2-吡喃酮糖酸

(α -D-arabino-Hex-2-ulopyranosonic acid)

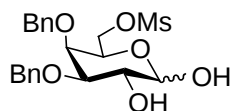
8.4.4.8. O-取代衍生物的命名

O-取代衍生物是指糖或糖衍生物的醇羟基氢被取代的产物。命名时用阿拉伯数字表示取代的位置；数字后用“O”以示氧取代衍生物，多个相同的原子或基团取代时在阿拉伯数字与“O”之间用中文数字标示，“O”不必重复；糖上羟基全部被相同的取代基取代的化合物不必用阿拉伯数字标示取代位置。当有多种不同取代基时，按取代基英文名的第一个字母的顺序排列，与英文命名一致。

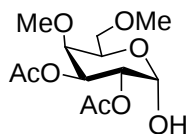
酰基或烷基“O”取代的糖衍生物的命名



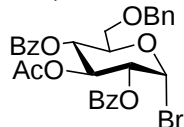
2,4-二-O-乙酰基-6-O-三苯甲基-D-吡喃葡萄糖
(2,4-Di-O-acetyl-6-O-trityl-D-glucopyranose)



3,4-二-O-苄基-6-O-甲磺酰基-D-吡喃半乳糖
(3,4-Di-O-benzyl-6-O-methanesulfonyl-D-galactopyranose)



2,3-二-O-乙酰基-4,6-二-O-甲基- α -D-吡喃半乳糖
(2,3-Di-O-acetyl-4,6-di-O-methyl- α -D-galactopyranose)

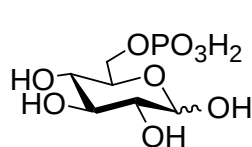


3-O-乙酰基-2,4-二-O-苯甲酰基-6-O-苄基-1-溴- α -D-吡喃葡萄糖
(3-O-Acetyl-2,4-di-O-benzoyl-6-O-benzyl- α -D-glucopyranosyl bromide)

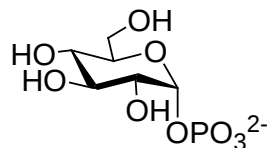
磷酸取代的糖衍生物命名

糖的磷酸酯通常被命名为某糖-磷酸(例如：葡萄糖-6-磷酸)或将磷酸作为“O”取代

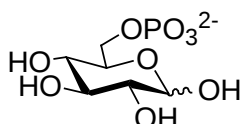
基命名为 *O*-磷酸(*O*-磷酰)糖。如果糖被两个或更多个磷酸基团酯化, 该化合物称作二磷酸、三磷酸等(如呋喃果糖 1, 6-二磷酸)或二(三)-*O*-磷酸糖。



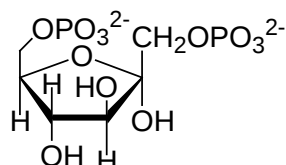
D-吡喃葡萄糖-6-磷酸
(D-Glucopyranose 6-(dihydrogen phosphate))



α -D-吡喃葡萄糖基磷酸二盐
(α -D-Glucopyranosyl phosphate)



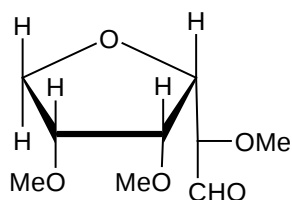
D-吡喃葡萄糖-6-磷酸二盐
(6-*O*-磷酰-D-吡喃葡萄糖盐)
(D-Glucopyranose 6-phosphate
or 6-*O*-Phosphonato-D-glucopyranose)



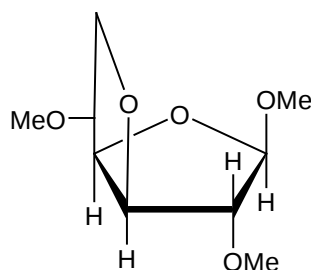
α -D-呋喃果糖-1,6-二磷酸盐
(1,6-二-*O*-磷酰- α -D-呋喃果糖盐)
(α -D-Fructofuranose 1,6-bisphosphate
or 1,6-Di-*O*-phosphonato- α -D-fructofuranose)

分子内醚的命名

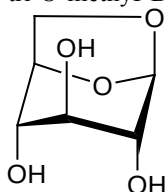
分子内醚是指由单糖或单糖衍生物(醛糖或酮糖)的两个羟基之间失去一分子水形成的衍生物。其命名方法是在糖名称前加“脱水”词头, 在词头前标上脱水的两个羟基的序号。



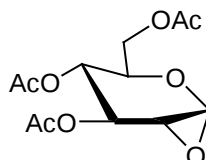
3,6-脱水-2,4,5-三-*O*-甲基-D-葡萄糖
(3,6-Anhydro-2,4,5-tri-*O*-methyl-D-glucose)



甲基 3,6-脱水-2,5-二-*O*-甲基- β -D-呋喃葡萄糖苷
(Methyl 3,6-anhydro-2,5-di-*O*-methyl- β -D-glucopyranoside)



1,6-脱水- β -D-吡喃葡萄糖
(1,6-Anhydro- β -D-glucopyranose)

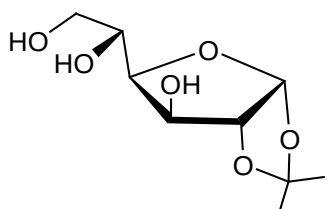


3,4,6-三-*O*-乙酰基-1,2-脱水- α -D-吡喃葡萄糖
(3,4,6-Tri-*O*-acetyl-1,2-anhydro- α -D-glucopyranose)

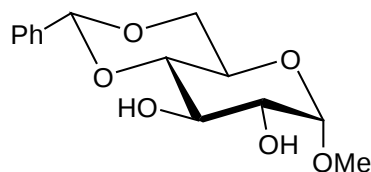
糖的环状缩醛衍生物

糖或者糖的衍生物与醛或酮反应形成糖的环状缩醛衍生物, 其命名方法类似于 *O*-

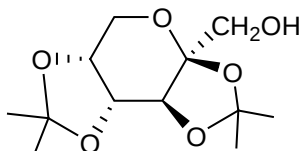
取代命名，在取代基前标上序号，二价的取代基命名为叉基 (苄叉基、异丙叉基等)。



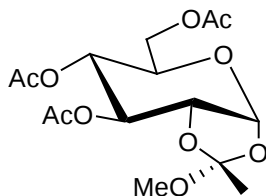
1,2-O-异丙叉基- α -D-呋喃葡萄糖
(1,2-O-Isopropylidene- α -D-glucofuranose)



(*R*)-4,6-O-苄叉基- α -D-葡萄糖甲苷
(Methyl (*R*)-4,6-O-benzylidene- α -D-glucopyranoside)



2,3:3,5-二-O-异丙叉基- β -D-吡喃果糖
(2,3:4,5-Di-O-isopropylidene- β -D-fructopyranose)



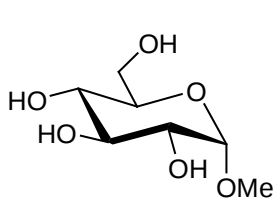
3,4,6-三-O-乙酰基- α -D-吡喃葡萄糖(*R*)-1,2-甲基原乙酸酯
或 3,4,6-三-O-乙酰基-[(*R*)-1,2-O-(1-甲氧基乙叉基)]- α -D-吡喃葡萄糖
(3,4,6-Tri-O-acetyl- α -D-glucopyranose (*R*)-1,2-(methyl orthoacetate)
or 3,4,6-Tri-O-acetyl-[(*R*)-1,2-O-(1-methoxyethylidene)]- α -D-glucopyranose)

8.4.4.9. 糖苷的命名

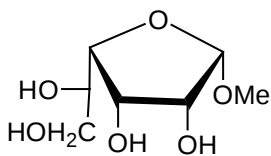
糖苷依形成缩醛、缩酮的类型不同，分为氧苷、硫苷、氮苷、碳苷、硒苷等，其中氧苷是指由糖的半缩醛或半缩酮羟基与另一个单糖的羟基或醇、酚的羟基脱水生成的化合物(氮苷的命名见核苷命名部分)。

氧苷的命名

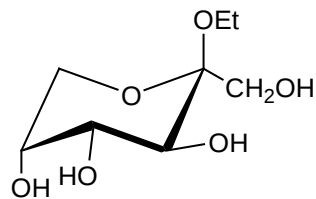
简单的苷元用糖苷命名，苷元的名称写在名称最前面或写在糖与苷字之间；复杂的苷元可将糖视为取代基来命名。



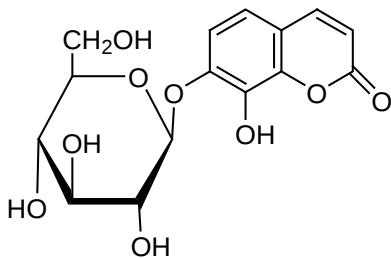
甲基 α-D-吡喃葡萄糖苷
(α-D-吡喃葡萄糖甲苷)
(Methyl α-D-glucopyranoside)



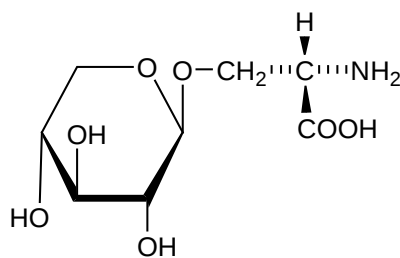
甲基 α-D-呋喃古洛糖苷
(α-D-呋喃古洛糖甲苷)
(Methyl α-D-gulofuranoside)



乙基 β-D-吡喃果糖苷
(β-D-吡喃果糖乙苷)
(Ethyl β-D-fructopyranoside)



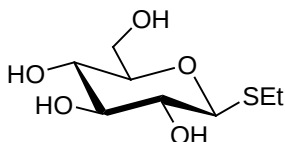
7-O-(β-D-吡喃葡萄糖基)-8-羟基香豆素
(7-O-(β-D-Glucopyranosyloxy)-8-hydroxycoumarin)



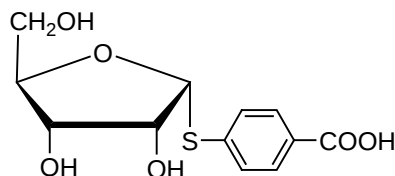
O³-β-D-吡喃木糖基-L-丝氨酸
(O³-β-D-Xylopyranosyl-L-serine)

硫苷的命名

硫苷是指氧苷 1 位的氧原子被硫取代的化合物，其命名与氧苷类似，只是在苷元名称后标上硫的位置或在苷字前加“硫(代)”字。当苷元较复杂时也可以苷元做母体，糖做取代基来命名。



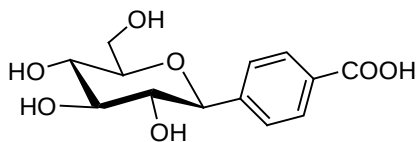
乙基 1-硫-β-D-吡喃葡萄糖苷
β-D-吡喃葡萄糖乙硫苷
(Ethyl 1-thio-β-D-glucopyranoside)



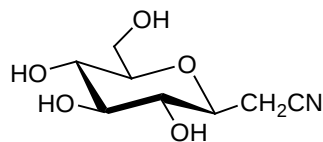
4-(α-D-呋喃核糖基硫)苯甲酸
或4-羧基苯基 1-硫-α-D-呋喃核糖苷
(4-(α-D-Ribofuranosylthio)benzoic acid
or 4-carboxyphenyl 1-thio-α-D-ribofuranoside)

碳苷化合物命名

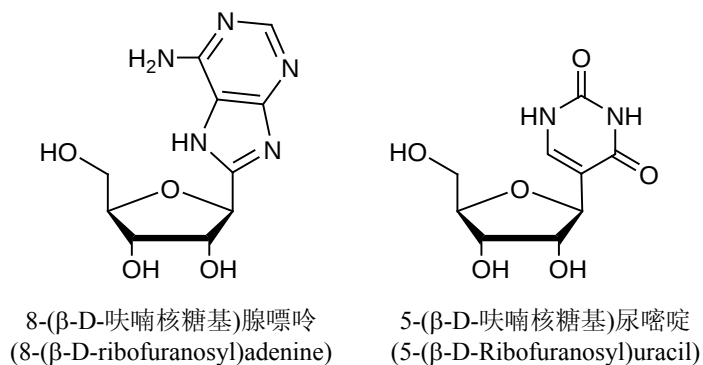
碳苷是指糖的端羟基和苷元碳原子上的氢之间脱掉一分子水而形成的化合物，其命名是以苷元做母体，糖做取代基来命名。



4-β-D-吡喃葡萄糖基苯甲酸
(4-β-D-glucopyranosylbenzoic acid)

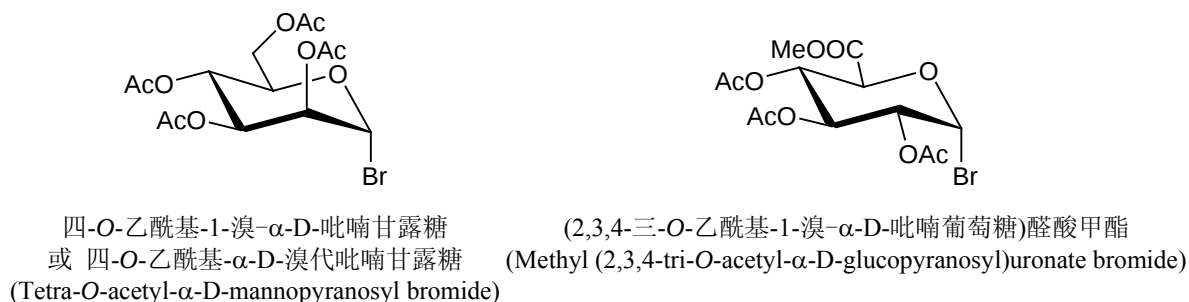


β-D-吡喃葡萄糖基乙腈
(β-D-glucopyranosyl acetonitrile)



8.4.4.10. 卤代糖

卤代糖是指糖端基的羟基被卤素取代的化合物，卤代糖命名为“1-卤”或卤代糖。



8.4.5. 寡糖 (Oligosaccharides)及多糖(polysaccharide)

寡糖是由多个单糖通过糖苷键连接起来的化合物。按照单糖的数目，可分为二糖、三糖、四糖、五糖等。寡糖与多糖的之间没有严格界限；“寡糖”通常是指有明确结构的化合物。

8.4.5.1. 寡糖及多糖书写方式

寡糖及多糖可采用扩展式、缩写式、简写式来表示其复杂的结构。

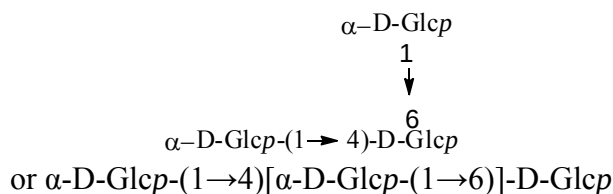
扩展形式

端基异构体以及构型符号写于单糖单元名称前；用斜体“*f*”表示呋喃糖，“*p*”表示吡喃糖；连接位置用箭头表示，放在两个糖单元名称之间的括号里，若两个单糖端基连接则用双向箭头表示；若省略 α/β 、D/L 或 *f/p*，则表示结构的细节未知。例如：

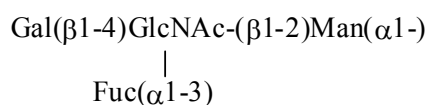
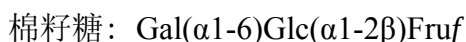
棉籽糖： α -D-Galp-(1→6)- α -D-Glcp-(1↔2)- β -D-Fruf

纤维三糖： β -D-Glcp-(1→4)- β -D-Glcp-(1→4)-D-Glcp

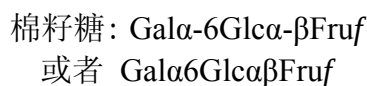
带支链的寡糖



缩写形式：将扩展式的构型符号（默认为D构型）以及表示环型（除特殊情况外均为吡喃糖）的字符省略，端基异构及其位置在括号中表示。例如：



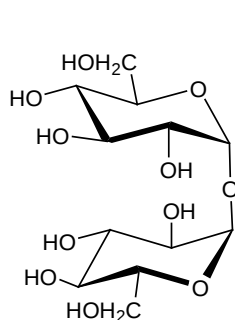
简写形式：将缩写式的端碳编号、括号、连接符省略掉的写法。例如：



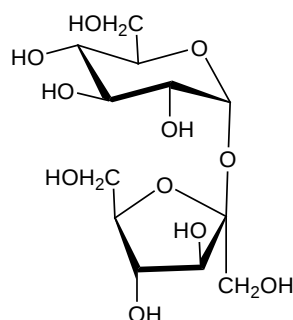
8.4.5.2. 寡糖的命名

二糖的命名

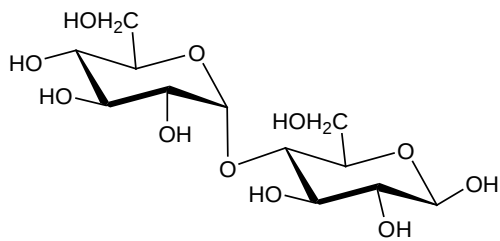
二糖是两个单糖通过糖苷键连接起来的化合物，依据连接方式的不同分为两种：一种是两个糖的半缩醛(半缩酮)羟基脱水成苷形成的非还原糖，命名为糖基糖苷；一种是一个糖的半缩醛(半缩酮)羟基与另一个糖的非半缩醛(半缩酮)羟基成苷形成的还原糖，命名为糖基糖。糖与糖之间链接方式用数字和箭头标示，并用括号括起来放在两糖名称之间，若是两个半缩醛(半缩酮)羟基成苷则用双箭头表示；也可将其中一个糖看做另一个糖的O取代基去命名。



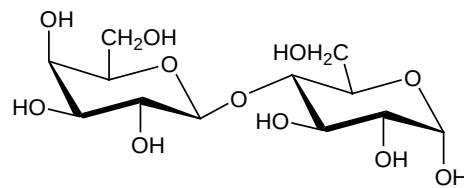
α-D-吡喃葡萄糖基 α-D-吡喃葡萄糖苷
(俗名：α, α-海藻糖)
[α-D-Glcp-(1↔1)-α-D-Glcp]
(α-D-Glucopyranosyl α-D-glucopyranoside)



β-D-呋喃果糖基 α-D-吡喃葡萄糖苷
(俗名：蔗糖)
[β-D-Fruf-(2↔1)-α-D-Glcp]
(β-D-Fructofuranosyl α-D-glucopyranoside)

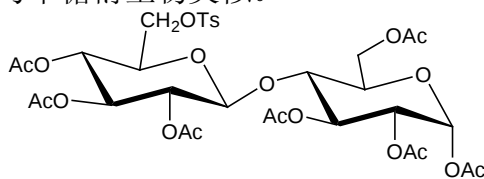


α-D-吡喃葡萄糖基-(1→4)-β-D-吡喃葡萄糖
或 4-O-α-D-吡喃葡萄糖基-β-D-吡喃葡萄糖
(俗名: β-麦芽糖)
(α-D-Glucopyranosyl-(1→4)-β-D-glucopyranose
or 4-O-α-D-glucopyranosyl-β-D-glucopyranose)



β-D-吡喃半乳糖基-(1→4)-α-D-吡喃葡萄糖
或 4-O-β-D-吡喃半乳糖基-α-D-吡喃葡萄糖
(俗名: α-乳糖)
(β-D-Galactopyranosyl-(1→4)-α-D-glucopyranose
or 4-O-β-D-galactopyranosyl-α-D-glucopyranose)

二糖衍生物的命名与单糖衍生物类似。

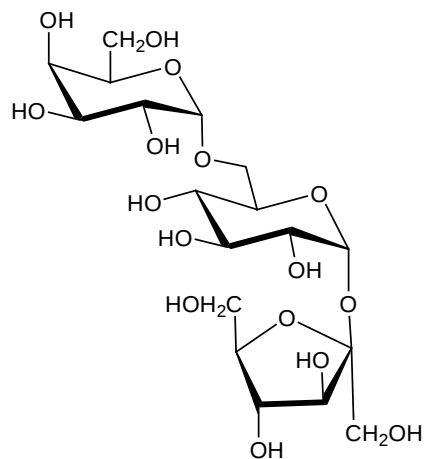


1,2,2',3,3',4',6'-七-O-乙酰基-6'-O-对甲苯磺酰基-α-纤维二糖
2,3,4-三-O-乙酰基-6-O-对甲苯磺酰基-β-D-吡喃葡萄糖基-(1→4)-1,2,3,6-四-O-乙酰基-α-D-吡喃葡萄糖
(1,2,2',3,3',4',6'-Hepta-O-acetyl-6'-O-tosyl-α-cellobiose
or 2,3,4-Tri-O-acetyl-6-O-tosyl-β-D-glucopyranosyl-(1→4)-1,2,3,6-tetra-O-acetyl-α-D-glucopyranose)

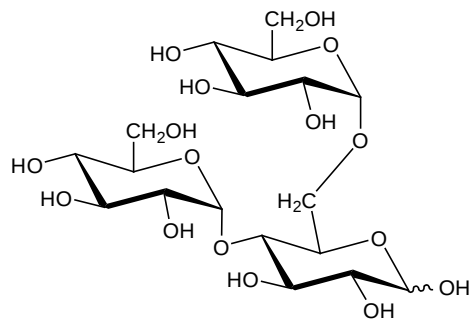
三糖的命名

三糖依糖的连接方式分为线性三糖和带分支三糖，线性三糖命名为糖基-糖基-糖苷或者糖基-糖基-糖。糖与糖之间连接方式用数字和箭头标示，并用括号括起来放在两糖名称之间，若是两个半缩醛(半缩酮)羟基成苷则用双箭头表示。也可将其中一个糖看做母体化合物，其余两个糖看作是母体糖的“O”取代基去命名。

带分支三糖是以带有两个分支的单糖做母体，另两个单糖做取代基命名，可以将两个单糖作为“O”取代基命名，方法与“O”取代命名一致；也可命名为糖基[糖基]糖或糖苷，将第二个糖基用中括号括起来以示两个糖基均连在母体糖上，在糖基后面用数字和箭头标示糖与糖之间的连接方式。

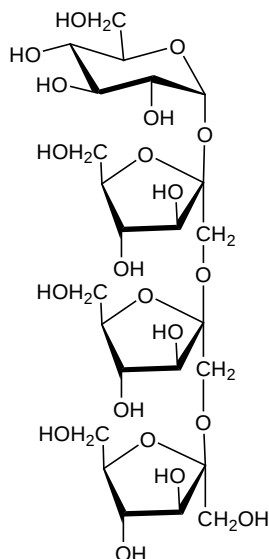


α -D-吡喃半乳糖基-(1 $\rightarrow$ 6)- α -D-吡喃葡萄糖基 β -D-呋喃果糖苷
(俗名：棉籽糖)
(α -D-Galactopyranosyl-(1 $\rightarrow$ 6)- α -D-glucopyranosyl β -D-fructofuranoside)



α -D-吡喃葡萄糖基-(1 $\rightarrow$ 4)-[α -D-吡喃葡萄糖基-(1 $\rightarrow$ 6)]-D-吡喃葡萄糖
[或 4,6-二-O-(α -D-吡喃葡萄糖基)-D-吡喃葡萄糖]
(α -D-Glucopyranosyl-(1 $\rightarrow$ 4)-[α -D-glucopyranosyl-(1 $\rightarrow$ 6)]-D-glucopyranose)
[or 4,6-Di-O-(α -D-glucopyranosyl)-D-glucopyranose]

其它更多糖单元寡糖的命名与二糖、三糖类似。

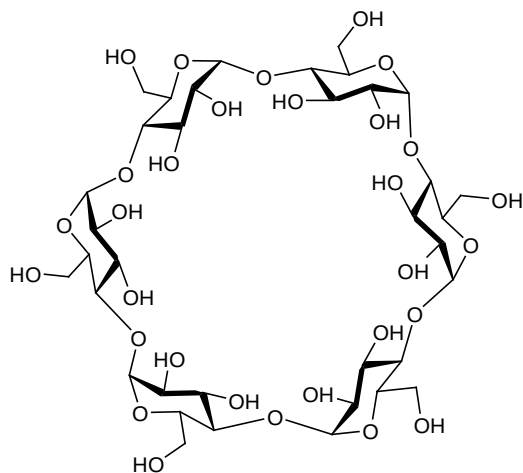


β-D-呋喃果糖基-(2→1)-β-D-呋喃果糖基-(2→1)-β-D-呋喃果糖基-α-D-吡喃葡萄糖苷
 $[\beta\text{-D-Fruf-(2}\rightarrow\text{1)-}\beta\text{-D-Fruf-(2}\rightarrow\text{1)-}\beta\text{-D-Fruf-(2}\rightarrow\text{1)-}\alpha\text{-D-Glcp}]$
 (俗名：真菌四糖)

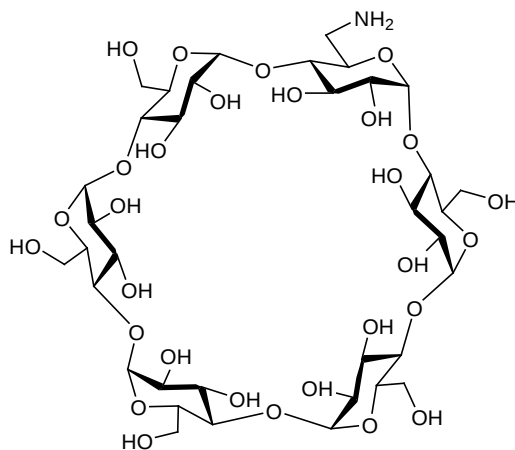
(β-D-Fructofuranosyl-(2→1)-β-D-fructofuranosyl-(2→1)-β-D-fructofuranosyl α-D-glucopyranoside)

环状寡糖的命名

由单一寡糖单元组成的环糖可以用添加前缀“环(cyclo)”的半系统命名方法命名，单元数用数字表示。例如，α环糊精(α-cyclodextrin, α-CD)可命名为环麦芽六糖(cyclomaltohexaose); β环糊精(β-cyclodextrin, β-CD)为环麦芽七糖(cyclomaltoheptaose); γ环糊精(γ-cyclodextrin, γ-CD)为环麦芽八糖(cyclomaltooctaose)。若环状寡糖的某单元糖有取代基，用数字标明取代基在糖上的位置，用数字的上标标示取代基所在糖的位置。



环麦芽六糖
 (Cyclomaltohexaose (α-cyclodextrin, α-CD))



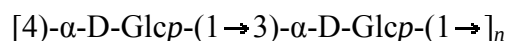
6¹-氨基-6¹-去氧环麦芽六糖
 (6¹-Amino-6¹-deoxycyclomaltohexaose)

8.4.5.3. 多糖的命名

多糖(polysaccharide)又称聚糖(glycan)是指由大量单糖(monosaccharide, glucose)通过糖苷键所形成的高分子化合物。由相同单糖片段形成的多糖称为同多糖(homopolysaccharides)或同聚糖(homoglycans); 由两个或两个以上不同单糖组成的多糖可称为杂多糖(heteropolysaccharide)或杂聚糖 (heteroglycan)。

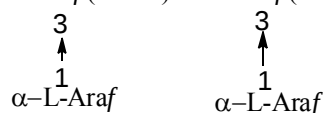
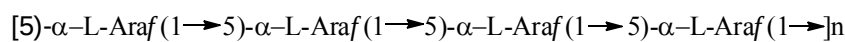
同多糖的命名

用 D- 或 L-标示糖的构型; 若同多糖的连接方式相同时, 糖苷键用数字和箭头标示在构型符号的前面; 若连接方式不同可不标示连接方式。



(α)-D-葡聚糖 (黑曲霉多糖)

(D-glucan; Nigeran)



(α)-L-呋喃阿拉伯聚糖

(α -L-arabinan)

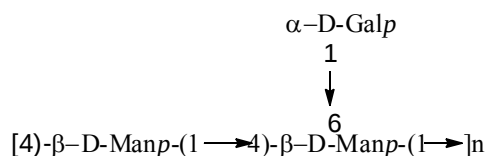


(1 $\rightarrow$ 4) - α -D 吡喃葡聚糖

[(1 $\rightarrow$ 4)- α -D-glucan]

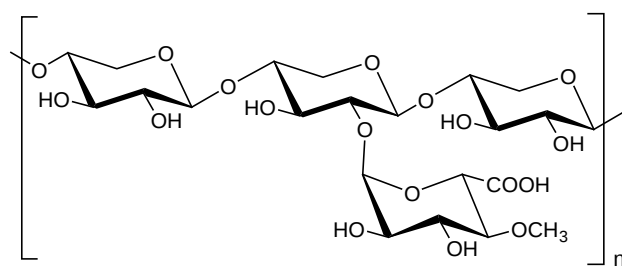
杂多糖 的命名

当杂多糖有仅由一种糖残基组成的主链(骨架)时, 此种糖残基置于最后称为聚糖, 其余残基按照英文词头字母顺序作为前缀。当不存在单一糖型的主链时, 所有的残基按照英文词头字母顺序排列, 并以后缀“聚糖”结尾。

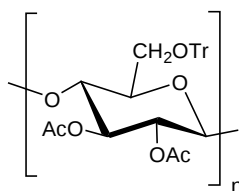


D-半乳-D-甘露聚糖 (半乳甘露聚糖)

(D-galacto-D-mannan (guaran))



(4-O-甲基- α -D-葡萄糖醛酸)-D-木聚糖
((4-O-Methyl- α -D-glucurono)-D-xylan)



2,3-二-O-乙酰基-6-O-三苯甲基直链淀粉
(2,3-Di-O-acetyl-6-O-tritylamylose)

参考文献:

1. *Pure & Appl Chem*, Vol. 68, No.10, pp.1919-2008 (1996).
2. 蔡孟深, 李中军著, 糖化学, 化学工业出版社, 2007。
3. 孔繁祚著, 糖化学, 科学出版社, 2005。

8.5. 氨基酸和多肽 (Amino acids and peptides) [1]

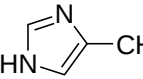
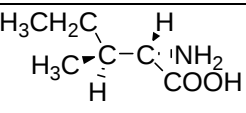
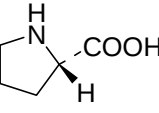
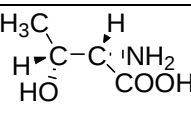
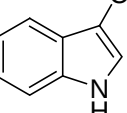
本节叙述构成肽和蛋白质砌块的氨基酸的命名。它们是官能性母体化合物，其保留使用的俗名见表 8-5-1。较不常见氨基酸的俗名见表 8-5-2。氨基酸的命名有两种类型：一种是在官能性母体化合物俗名的基础上进行一定的官能团化和取代后的半系统命名，另一种是对所有其它化合物都普遍适用的系统命名。

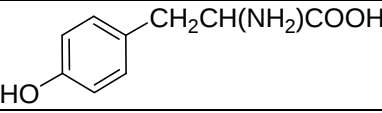
从天然产物有机化学的角度，本节仅建议肽和蛋白质领域以外的氨基酸衍生物的命名规则。

8.5.1. 基于俗名的命名法 (Nomenclature based on trivial names)

在蛋白质中发现的 α -氨基酸的俗名，分子式以及它们的缩写符号见表 8-5-1。

表 8-5-1. 保留俗名的 α -氨基酸

中文俗名	英文俗名	符号	符号	分子式
丙氨酸	alanine	Ala	A	$\text{CH}_3\text{-CH}(\text{NH}_2)\text{-COOH}$
精氨酸	arginine	Arg	R	$\text{H}_2\text{N-C(=NH)-NH-}[\text{CH}_2]_3\text{-CH}(\text{NH}_2)\text{-COOH}$
门冬酰胺	asparagine	Asn	N	$\text{H}_2\text{N-CO-CH}_2\text{-CH}(\text{NH}_2)\text{-COOH}$
门冬氨酸	aspartic acid	Asp	D	$\text{HOOC-CH}_2\text{-CH}(\text{NH}_2)\text{-COOH}$
半胱氨酸	cysteine	Cys	C	$\text{HS-CH}_2\text{-CH}(\text{NH}_2)\text{-COOH}$
谷氨酰胺	glutamine	Gln	Q	$\text{H}_2\text{N-CO-}[\text{CH}_2]_2\text{-CH}(\text{NH}_2)\text{-COOH}$
谷氨酸	glutamic acid	Glu	E	$\text{HOOC-}[\text{CH}_2]_2\text{-CH}(\text{NH}_2)\text{-COOH}$
甘氨酸	glycine	Gly	G	$\text{H}_2\text{N-CH}_2\text{-COOH}$
组氨酸	histidine	His	H	
异亮氨酸	isoleucine	Ile	I	 (L-型)
亮氨酸	leucine	Leu	L	$(\text{CH}_3)_2\text{CH-CH}(\text{NH}_2)\text{-COOH}$
赖氨酸	lysine	Lys	K	$\text{H}_2\text{N-}[\text{CH}_2]_4\text{-CH}(\text{NH}_2)\text{-COOH}$
甲硫氨酸	methionine	Met	M	$\text{CH}_3\text{-S-}[\text{CH}_2]_2\text{-CH}(\text{NH}_2)\text{-COOH}$
苯丙氨酸	phenylalanine	Phe	F	$\text{C}_6\text{H}_5\text{-CH}_2\text{-CH}(\text{NH}_2)\text{-COOH}$
脯氨酸	proline	Pro	P	 (L-型)
丝氨酸	serine	Ser	S	$\text{HO-CH}_2\text{-CH}(\text{NH}_2)\text{-COOH}$
苏氨酸	threonine	Thr	T	 (L-型)
色氨酸	tryptophan	Trp	W	

酪氨酸	tyrocine	Tyr	T	
缬氨酸	valine	Val	V	$(\text{CH}_3)_2\text{CH}-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{COOH}$
非特定氨基酸		Xaa	X	

8.5.1.1. α -氨基酸的构型

α -氨基酸在 α -碳上的构型习惯上用立体词头‘D’或‘L’来描述它们与‘D’或‘L’甘油醛的形式上的关系，立体词头‘ ξ ’表示未知的构型（参见第7章）。表 8-5-1 中的天然氨基酸（除无手性的甘氨酸外）均为‘L’构型，按CIP系统命名，除半胱氨酸外，‘L’构型相当于‘S’构型。

8.5.1.2. α -氨基酸的官能团修饰衍生物的命名

上述保留的 α -氨基酸俗名可作为官能团母体化合物的名称，对其形成的盐和酯以及取代在N、O、S原子上的烷基、芳基和酰基衍生物进行半系统命名。英文中表示酰基 $\text{H}_2\text{N}-\text{CHR}-\text{CO}-$ 时，是通过将氨基酸名称末尾的‘ine’（或者在色氨酸 tryptophan 的情况下将‘an’）改为‘yl’来形成的，例如 丙氨酰基（alanyl）、缬氨酰基（valyl）、色氨酰基（tryptophyl）。半胱氨酰基用‘Cysteinyl’而不用‘cysteyl’；胱氨酰基‘cystyl’是由胱氨酸派生的。但中文中则较为简单，将末尾酸改为酰基即可；类似地，英文中表示酯 $\text{R}-\text{CO}-\text{OR}'$ 时，是通过将氨基酸名称末尾的字母‘e’改为‘ate’来形成的（或者在色氨酸 tryptophan 的情况下直接加‘ate’），而在中文中，则按一般方法在酸的名称后加上取代基的名称（‘基’常省略）再加上‘酯’字来形成。

例：

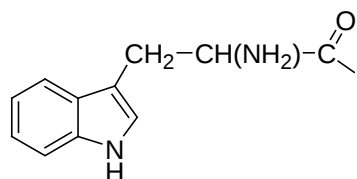


甘氨酸正离子（glycinium, glycine cation）

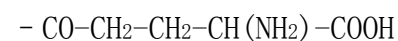


氯化赖氨酸正离子（lysiniium chloride）

赖氨酸单盐酸盐（lysine monohydrochloride）

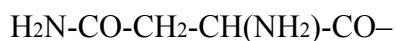


色氨酰基（tryptophyl）

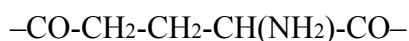


γ-谷氨酰基 (γ-glutamyl)

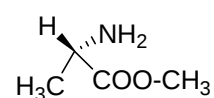
谷氨酰-5-基 (glutam-5-yl)



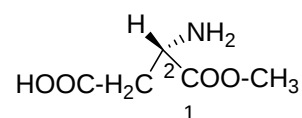
门冬酰胺酰基 (Asparaginy1)



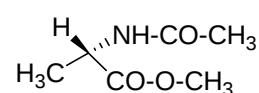
谷氨酰基 (Glutamoyl)



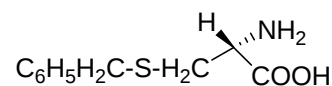
丙氨酸甲酯 (methyl L-alaninate, alanine methyl ester)



门冬氨酸 1-甲酯 (1-methyl L-aspartate)



N-乙酰基-丙氨酸甲酯 (methyl N-acetyl-L-alaninate)



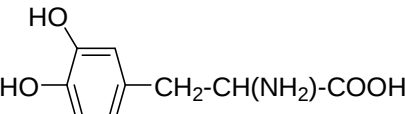
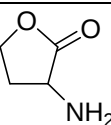
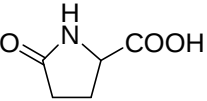
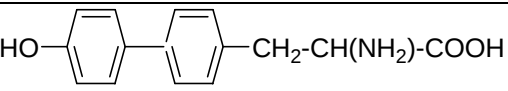
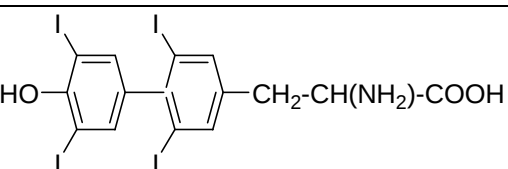
S-苄基-半胱氨酸 (S-benzyl-L-cysteine)

8.5.1.3. 其他保留使用的氨基酸俗名

除了在表 8-5-1中所列出的之外,还有其他一些较少见的氨基酸的俗名见表8-5-2。它们也可作为官能团母体化合物的名称,对其形成的衍生物进行半系统命名。

表 8-5-2 在表8-5-1所列以外有俗名的氨基酸

中文俗名	英文俗名	符号	分子式
β-丙氨酸	β-alanine	(β Ala)	$\text{H}_2\text{N}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{COOH}$
别异亮氨酸	alloisoleucine	alle	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \diagup \\ \text{H}_3\text{C}-\text{H}_2\text{C}-\text{C} \text{---} \text{NH}_2 \\ \diagdown \\ \text{H} \end{array} \text{---} \text{C} \text{---} \text{COOH} \\ \diagup \\ \text{CH}_3$
别苏氨酸	allothreonine	aThr	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \diagup \\ \text{H}_3\text{C}-\text{C} \text{---} \text{NH}_2 \\ \diagdown \\ \text{HO} \end{array} \text{---} \text{C} \text{---} \text{COOH} \\ \diagup \\ \text{H}$

醛赖氨酸	allysine	——	$\text{HCO}-[\text{CH}_2]_3-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{COOH}$
瓜氨酸	citrulline	Cit	$\text{NH}_2-\text{CO}-\text{NH}-[\text{CH}_2]_3-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{COOH}$
胱硫醚	cystathionine	$\begin{array}{c} \text{Al} \\ \\ \text{HCy} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{CH}_2-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{COOH} \\ \\ \text{S}-[\text{CH}_2]_3-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{COOH} \end{array}$
磺丙氨酸	cysteic acid	Cya	$^-\text{O}_3\text{S}-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{COOH}$
胱氨酸	cystine	$\begin{array}{c} \text{Cys} \\ \\ \text{Cys} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{S}-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{COOH} \\ \\ \text{S}-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{COOH} \end{array}$
多巴	dopa	——	
高半胱氨酸	homocysteine	Hcy	$\text{HS}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{COOH}$
高丝氨酸	homoserine	Hse	$\text{HO}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{COOH}$
高丝氨酸内酯	homoserine lactone	Hsl	
羊毛硫氨酸	lanthionine	$\begin{array}{c} \text{Ala} \\ \\ \text{Cys} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H}_2\text{C}-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{COOH} \\ \\ \text{S}-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{COOH} \end{array}$
鸟氨酸	ornithine	Orn	$\text{H}_2\text{N}-[\text{CH}_2]_3-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{COOH}$
5-氧亚基脯氨酸	5-oxoproline	Glp	
肌氨酸	sarcosine	Sar	$\text{CH}_3-\text{NH}-\text{CH}(\text{NH}_2)-\text{COOH}$
甲状腺原氨酸	thyronine	——	
甲状腺素	thyroxine	Thx	

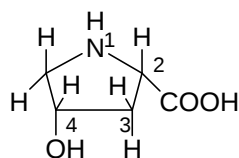
8.5.2. 氨基酸及其衍生物的取代操作法命名 (Substitutive names of amino acids and derivatives)

除了在8.5.1.2节提及的盐、酯和在N、O、S上取代所形成的衍生物外，其余的氨基酸衍生物的名称建议优先按取代操作法命名，使用为形成系统的取代操作法名称所使用的原则、规则和惯例。一般也可采用以氨基酸俗名为官能团母体化合物的半系统命名。

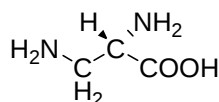
8.5.2.1. 碳原子上取代衍生物的命名

在碳原子上发生取代的氨基酸的名称按系统的取代操作法命名。使用CIP立体词头。

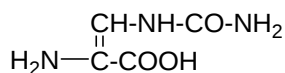
例如：



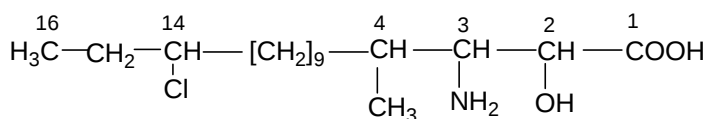
4-羟基吡咯烷-2-甲酸 (pyrrolidine-2-carboxylic acid)
 (2S,4S)-4-羟基脯氨酸 ((2S,4S)-4-hydroxyproline)
 (4S)-4-羟基-L-脯氨酸 ((4S)-4-hydroxy-L-proline)
 顺式-4-羟基-L-脯氨酸 (cis-4-hydroxy-L-proline)



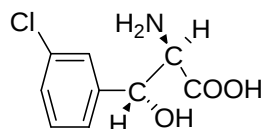
(2S)-2,3-二氨基丙酸 ((2S)-2,3-diaminopropanoic acid)
 L-2,3-二氨基丙酸 (L-2,3-diaminopropanoic acid)
 (2S)-2-氨基-β-丙氨酸 ((2S)-2-amino-β-alanine)
 3-氨基-L-丙氨酸 (3-amino-L-alanine)



(2E)-3-(氨基羰基氨基)-2-氨基丙-2-烯酸
 ((2E)-3-(carbamoylamino)-2-aminoprop-2-enoic acid)
 (2E)-2,3-二脱氢-3-脲基-L-丙氨酸 ((2E)-2,3-didehydro-3-ureido-L-alanine)

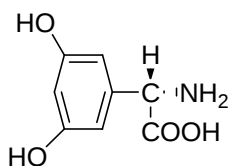


(2ξ, 3ξ, 4ξ, 14ξ)-3-氨基-14-氯-2-羟基-4-甲基十六烷酸
 ((2ξ, 3ξ, 4ξ, 14ξ)-3-amino-14-chloro-2-hydroxy-4-methylhexadecanoic acid)
 3-[(1ξ, 14ξ)-11-氯-1-甲基十三烷基]-2-羟基-β-丙氨酸
 (3-[(1ξ, 14ξ)-11-chloro-1-methyltridecyl]-2-hydroxy-β-alanine)



(2R, 3R)-2-氨基-3-(3-氯苯基)-3-羟基丙酸
 ((2R,3R)-2-amino-3-(3-chlorophenyl)-3-hydroxypropanoic acid)
 3-氯-(R)-β-羟基-D-酪氨酸

(3-chloro-(*R*)- β -hydroxy-D-tyrosine)



(2*S*)-2-氨基-3-(3,5-二羟基苯基)乙酸

((2*S*)-2-amino-3-(3,5-dihydroxyphenyl)acetic acid)

L-(3,5-二羟基苯基)甘氨酸

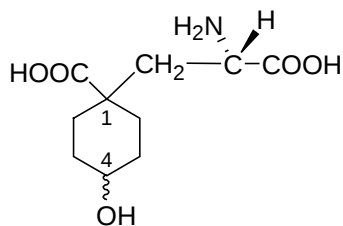
(L-(3,5-dihydroxyphenyl)glycine)

8.5.2.2. 氨基酸作为取代基时的命名

8.5.2.2.1. 由氨基酸碳原子衍生的取代基 (Substituent groups with the free valence on a carbon atom)

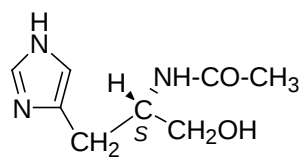
当存在具有优先作为后缀的特性基团时， α -氨基酸必须作为取代基的时候，化合物名称按照取代操作命名法的规则、原则和惯例来形成。

例如：



1-[(2*S*)-2-氨基-2-羧基乙基]-4-羟基环己烷-1-甲酸

(1-[(2*S*)-2-amino-2-carboxyethyl]-4-hydroxycyclohexane-1-carboxylic acid)



N-[(2*S*)-1-羟基-3-(1*H*-咪唑-4-基)丙-2-基]乙酰胺

(*N*-[(2*S*)-1-hydroxy-3-(1*H*-imidazol-4-yl)propan-2-yl]acetamide)

8.5.2.2.2. 由氨基酸氮原子衍生的取代基 (Substituent groups with the free valence on a nitrogen atom)

英文命名中，从氨基酸的氨基上拿掉一个氢原子而产生的取代基团也可以通过将有关的氨基酸名称的末尾字母e改为o，在色氨酸tryptophan的末尾添加字母o，以及为门冬氨酸aspartic acid和谷氨酸glutamic acid的相应取代基分别定名为asparto和glutato。

在中文命名中，则可简单地称为某氨基酸基，或通过取代操作法来命名。

例：

-HN-CH₂-COOH
甘氨酸基 (Glycino)
(羧基甲基)氨基 ((carboxymethyl)amino)

当在氨基酸中有两个或更多个氮原子时,推荐使用定位符 N^x ,其中上标 x 表示 N 所在碳原子的位置。

例:

-HN-[CH₂]₄-CH(NH₂)-COOH
 N^6 -赖氨酸基 (N^6 -lysino)
(5-氨基-5-羧基戊基)氨基 ((5-amino-5-carboxypentyl)amino)

-HN-C(=NH)-NH-[CH₂]₃-CH(NH₂)-COOH
 N^0 -精氨酸基 (N^0 -arginino)
 N' -(4-氨基-4-羧基丁基)甲咪基氨基
(N' -(4-amino-4-carboxybutyl)carbamimidoylamino)
(N' -(4-amino-4-carboxybutyl)carbamimidamido) ---IUPAC-2004命名

-HN-CO-[CH₂]₂-CH(NH₂)-COOH
 N^5 -谷氨酸基 (N^5 -glutamino)
(4-氨基-4-羧基)丁酰胺基 ((4-amino-4-carboxy)butanamido)

8.5.2.2.3. 由氨基酸氧或硫原子衍生的取代基 (Substituent groups with the free valence on an oxygen or sulfur atom)

在英文命名中,从氧原子或硫原子上拿掉一个氢原子而形成的取代基也可以通过将末尾的字母e改为‘x-yl’来命名, x 是从其上拿掉氢原子的那个原子的位次。例如 cystein-S-yl, threonin- O^3 -yl, alanin-3-yl, 或者在 aspartic, glutamic and tryptophan 的末尾加 ‘x-yl’, 如 aspartic-2-yl, tryptophan-2-yl。中文命名则可简单地通过在氨基酸名称后加 ‘x-基’ (x 表示游离价键所在的原子) 来命名。

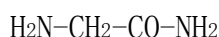
例如:

-S-CH₂-CH(NH₂)-COOH
半胱氨酸-S-基 (cystein-S-yl)
(2-氨基-2-羧基乙基)硫烷基 ((2-amino-2-carboxyethyl)sulfanyl)

8.5.2.3. 氨基酸的酰胺、酰苯胺、酰肼以及类似衍生物的命名 (Amides, anilides, hydrazides and analogous derivatives)

在英文命名中,从氨基酸衍生的酰胺的名称可通过将氨基酸名称末尾字母e改为 ‘amide’, 或者在 tryptophan 的情况下就在氨基酸名称后加 ‘amide’ 来命名。中文命名中,则在氨基酸名称后直接加 ‘酰胺’ 即可, ‘酸’ 字可省略。

例:



甘氨(酸)酰胺 (Glycinamide)

2-氨基乙酰胺 (2-aminoacetamide)

注: 门冬氨酸的4-酰胺有自己的名称门冬酰胺, 谷氨酸的5-酰胺的名称是谷酰胺。它们的1-酰胺则分别称为门冬氨(酸)1-酰胺和谷氨(酸)1-酰胺。

酰苯胺在通常的命名中, 用词尾‘酰苯胺’替代‘酰胺’即可。

例:



甘氨(酸)酰苯胺 (Glycinanilide)

2-氨基-1-*N*-苯基乙酰胺 (2-amino-1-*N*-phenylacetamide)

氨基酸酰胺氮原子上的取代按照酰胺的命名方法进行系统命名, 也可采用半系统命名。

例:



1-*N*-乙基- α -*N*-甲基甘氨(酸)酰胺 (1-*N*-ethyl-2-*N*-methylglycinamide)

1-*N*-乙基-2-(甲氨基)乙酰胺 (1-*N*-ethyl-2-(methylamino)acetamide)



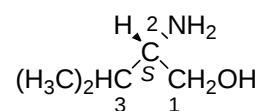
2-*N*-乙酰基甘氨(酸)酰胺 (2-*N*-acetylglycinamide)

2-(乙酰氨基)乙酰胺 (2-(acetylamino)acetamide)

8.5.2.4. 氨基酸的醇、醛、酮衍生物命名 (Alcohols, aldehydes, and ketones)

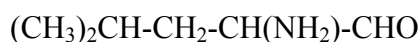
具有保留俗名的氨基酸相对应醇、醛、酮的一般习惯命名, 英文命名可将俗名末尾的字母e略去, 加上词尾‘ol’或‘al’; 中文命名则可在氨基酸俗名后加上词尾‘醇’或‘醛’。立体异构体用‘*R*’和‘*S*’表示。当然也可按取代命名法的原则进行系统命名。

例:



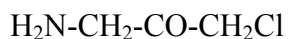
缬氨(酸)醇 (Valinol)

(*S*)-2-氨基-3-甲基丁-1-醇 ((*S*)-2-amino-3-methylbutan-1-ol)



亮氨(酸)醛 (Leucinal)

2-氨基-4-甲基戊醛 (2-amino-4-methylpentanal)



1-氨基-3-氯丙-2-酮 (1-amino-3-chloropropan-2-one)

甘氨酸氯甲烷 (glycylchloromethane) — 不推荐使用

8.5.3. 肽的命名 (Nomenclature of peptides)

8.5.3.1. 肽的名称 (Names of peptides)

在英文命名中, 用词尾 ‘yl’ 表示酰基的名称 (见 8.5.1.2. 节), 中文中则统一用酰代酸表示, 例如, 在氨基酸缩合反应中, 如果是甘氨酸 $\text{H}_2\text{N}-\text{CH}_2-\text{COOH}$ 酰化丙氨酸 $\text{H}_2\text{N}-\text{CH}(\text{CH}_3)-\text{COOH}$, 则所形成的二肽 $\text{H}_2\text{N}-\text{CH}_2-\text{CO}-\text{NH}-\text{CH}(\text{CH}_3)-\text{COOH}$ 命名为甘氨酸丙氨酸 (glycylalanine); 相反, 如果按相反的顺序缩合, 丙氨酸酰化甘氨酸, 则产物 $\text{H}_2\text{N}-\text{CH}(\text{CH}_3)-\text{CO}-\text{NH}-\text{CH}_2-\text{COOH}$ 命名为丙氨酸甘氨酸 (alanylglycine)。更大的肽也按照同样的方法命名, 如丙氨酸亮氨酸色氨酸 (alanylleucyltryptophan)。

8.5.3.2. 肽的符号表示 (Symbols of peptides)

三肽甘氨酸甘氨酸甘氨酸 (glycylglycylglycine) 的符号表示是 Gly-Gly-Gly, 由甘氨酸 glycine 的符号 gly 加短划构成。有三种情况:

(a) Gly- = $\text{H}_2\text{N}-\text{CH}_2-\text{CO}-$

(b) -Gly = $-\text{HN}-\text{CH}_2-\text{COOH}$

(c) -Gly- = $-\text{HN}-\text{CH}_2-\text{CO}-$

因此, 代表肽键的短划, 当写在符号的右边时, 意味着从氨基酸的 -COOH 基团去掉 OH, 当写在符号的左边时, 则意味着从氨基酸的 -NH₂ 基团去掉 H 原子。

8.5.3.3. 肽链中构型的表示 (Indication of configuration in peptides)

立体词头 L 不出现在肽链中。相反, 立体词头 D 则表述在每一个具有该构型的氨基酸的酰基名称的前面。当肽链中存在稀有氨基酸时, 在其符号的前面都要加上立体词头 ‘D’ 或 ‘L’。

例:

Leu-D-Glu-L-aThr-D-Val-Leu (符号 aThr 表示别苏氨酸)

8.5.3.4. 环肽 (Cyclic peptides)

环肽的名称由肽的名称 (放在括号内) 加前缀 ‘环’ (‘cyclo’) 构成。由符号构成的肽的名称放在括号 () 内, 前面也加上前缀 ‘环’ (‘cyclo’)。完全由氨基酸残基以正常肽键 (真肽键 (eupeptide linkage) [2]) 组成的肽需要使用立体词头 ‘D’。

当不使用氨基酸残基的符号时,合成的环肽需要使用立体词头 ‘R’ 和 ‘S’。IUPAC 和IUBM-2004年也提出了一新的环肽命名的征求意见稿,对脱水形成的环肽命名时采用前缀 ‘脱水’ (anhydro) [2]。

IUPAC-2004建议环肽首选的 IUPAC 名称应是取代操作命名法来的系统名称。

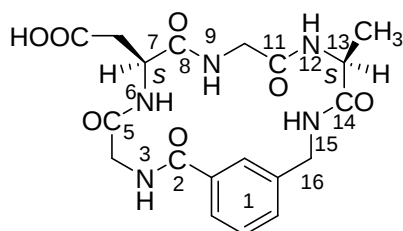
例:

环-(亮氨酸-D-苯丙氨酸-脯氨酸-缬氨酸-鸟氨酸-亮氨酸-D-苯丙氨酸-脯氨酸-缬氨酸-鸟氨酸-)

(cyclo-(leucyl-D-phenylalanyl-prolyl-valyl-ornithyl-leucyl-D-phenylalanylprolyl-valyl-ornithyl-))

环-(Leu-D-Phe-Pro-Val-Orn-Leu-D-Phe-Pro-Val-Orn-)

(cyclo-(Leu-D-Phe-Pro-Val-Orn-Leu-D-Phe-Pro-Val-Orn-))



环-(门冬酰-甘氨酸-丙氨酸-m-氨基甲基苯甲酰-甘氨酸-)

(cyclo-(aspartyl-glycyl-alanyl-m-aminomethylbenzoyl-glycyl-))

(cyclo-(Asp-Gly-Ala-m-aminomethylbenzoyl-Gly-))

2-[(7S, 13S)-2, 5, 8, 11, 14-五氧亚基-3, 6, 9, 12, 15-五氮杂-1(1, 3)-苯杂环十六番-7-基]乙酸 ---IUPAC-2004系统命名

(2-[(7S,13S)-2,5,8,11,14-pentoxo-3,6,9,12,15-pentaaza-1(1,3)-benzenacyclohexadecaphan-7-yl]acetic acid)

在肽的命名中,前缀‘endo’和‘des’需要特别加以说明。在此,‘endo’和‘des’和一般有机化合物命名中的含义不同。

8.5.3.5. 前缀 ‘endo’ (The prefix ‘endo’)

在肽的命名中,前缀‘endo’(非斜体)用来表明在肽的确定位置上插入一个氨基酸残基。例如,endo-4a-酪氨酸-血管紧张素II(endo-4a-tyrosine-angiotensin II)表明,在血管紧张素II的结构的4和5位之间插入一个酪氨酸残基。前缀‘endo’不应和立体表述符‘endo’(斜体)混淆。

8.5.3.6. 前缀 ‘des’ (The prefix ‘des’)

在肽的命名中,前缀 ‘des’用来表示在肽结构的任何位置移除一个氨基酸残基。例如,des-7-脯氨酸-催产素(des-7-proline-oxytocin)表明,在催产素7位的脯氨酸残基已经被移除。而在前所叙述的母体结构修饰中,前缀 ‘des’用来表示甾体化合物末端环

的移除，同时在相邻环的各端添加适当数目的氢原子。

参考文献

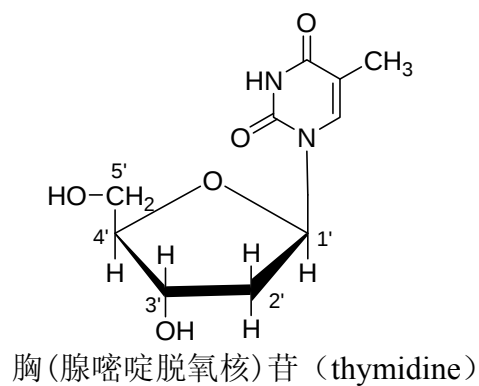
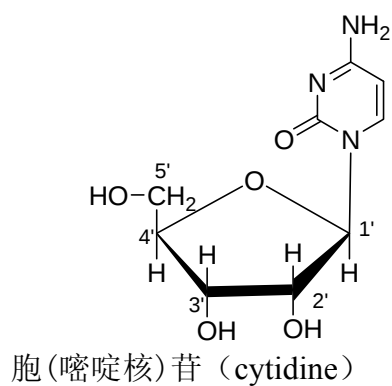
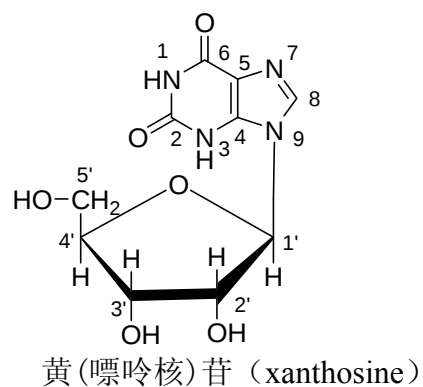
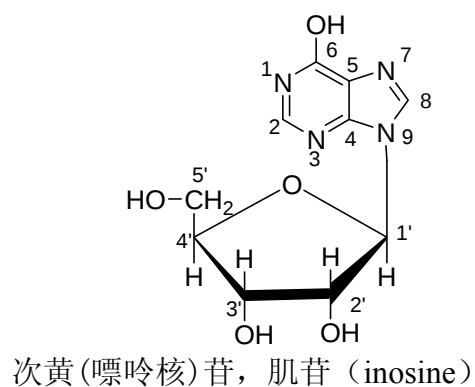
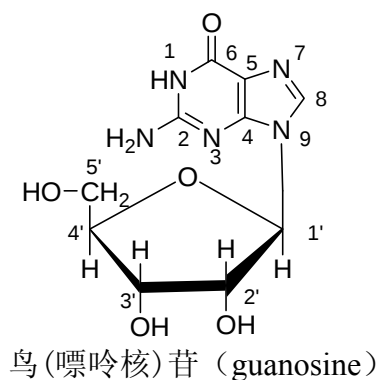
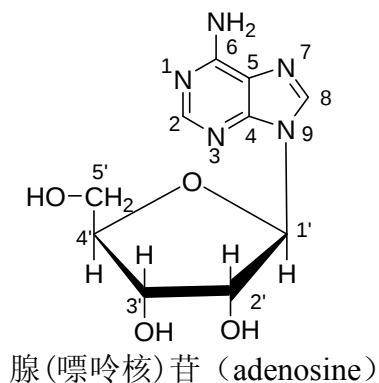
- [1] IUPAC-IUB Joint Commission on Biochemical Nomenclature (JCBN), Recommendations 1983, Nomenclature and Symbolism for Amino. Acids and Peptides *Pure Appl. Chem.* **1999**, 56(5), 595-624.
- [2] International Union of Biochemistry and Molecular Biology, Joint Commission on Biochemical Nomenclature; International Union of Pure and Applied Chemistry, Chemical Nomenclature and Structure Representation Division, “Nomenclature of Cyclic Peptides, Recommendations 2004”. (Provisional Recommendations)

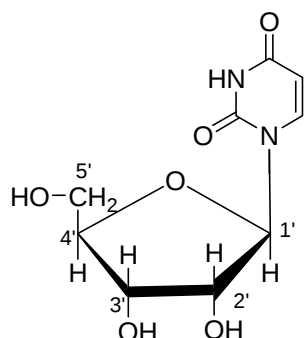
8.6. 核苷和核苷酸 (Nucleosides and Nucleotides)

8.6.1. 核苷

核苷是嘧啶或嘌呤碱（腺嘌呤(adenine)、鸟嘌呤(guanine)、黄嘌呤(xanthine)、胸腺嘧啶(thymine)、胞嘧啶(cytosine)和尿嘧啶(uracil)）的核糖基或脱氧核糖基衍生物，都保留使用俗名。

8.6.1.1. 保留使用的核苷俗名见下，中文括号内的字一般省略。



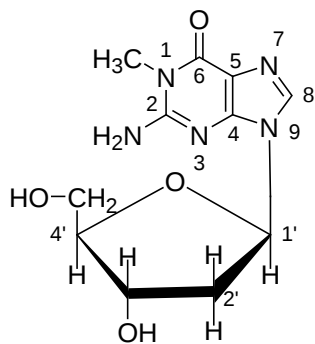


尿(嘧啶核)苷 (uridine)

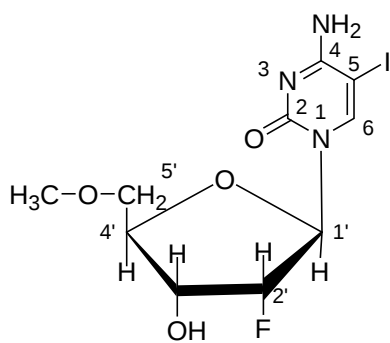
8.6.1.2. 核苷上的取代 (Substitution on nucleosides)

8.6.1.2.1. 核苷中嘌呤和嘧啶环上所有取代衍生物的命名都可以原俗名为母体名的基础上进行，氧亚基的置换可用官能性置换前缀来描述。核糖基修饰时的命名见前述碳水化合物 (见 8.4节)，核糖部分的2'- 和 3'- 脱氧修饰则完全可以在俗名的基础上命名。

例：

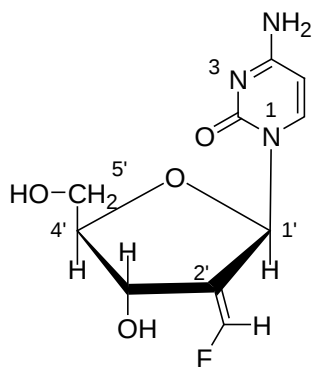


2'-脱氧-1-甲基鸟(嘌呤核)苷 (2'-deoxy-1-methylguanosine)



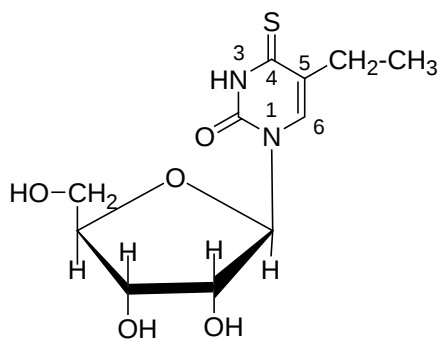
2'-脱氧-2'-氟-5-碘-5'-O-甲基胞(嘧啶核)苷
(2'-deoxy-2'-fluoro-5-iodo-5'-O-methylcytidine)

4-氨基-1-[(2R,3R,4R,5R)-3-氟-4-羟基-5-(羟甲基)氧杂环戊烷-2-基]-5-碘嘧啶-2(1H)-酮
(4-amino-1-[(2R,3R,4R,5R)-3-fluoro-4-hydroxy-5-(hydroxymethyl)oxolan-2-yl]-5-iodopyrimidin-2(1H)-one) —— (系统命名)

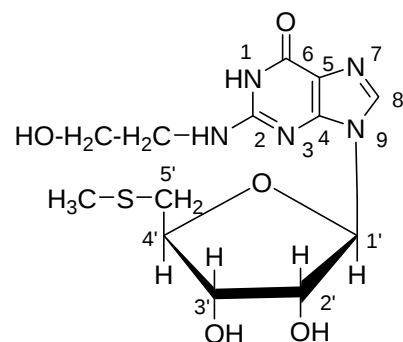


(2'E)-2'-脱氧-2'-(氟甲亚基)胞(嘧啶核)苷 ((2'E)-2'-deoxy-2'-(fluoromethylidene)cytidine)
4-氨基-1-[(2R,3E,4S,5R)-4-羟基-5-(羟甲基)-3-(氟甲亚基)氧杂环戊烷-2-基]嘧啶-2(1H)-酮

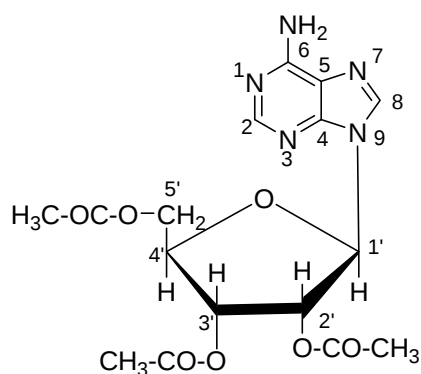
(4-amino-1-[(2R,3E,4S,5R)-4-hydroxy-5(hydroxymethyl)-3-(fluoromethylidene)oxolan-2-yl]pyrimidin-2(1H)-one) —— (系统命名)



5-乙基-4-硫代尿(嘧啶核)苷 (5-ethyl-4-thiouridine)



N-(2-羟乙基)-5'-S-甲基-5'-硫代鸟(嘌呤核)苷
(N-(2-hydroxyethyl)-5'-S-methyl-5'-thioguanosine)

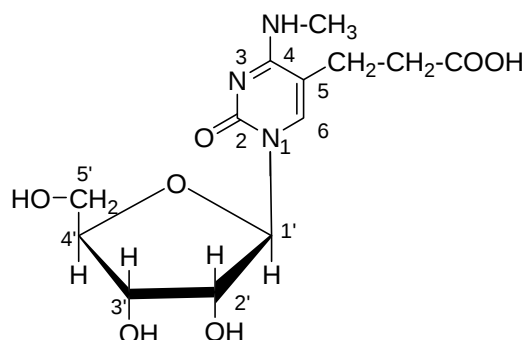


2',3',5'-三-O-乙酰基腺(嘌呤核)苷 (2',3',5'-tri-O-acetyladenosine)

腺嘌呤核苷 2',3',5'-三乙酸酯 (adenosine 2',3',5'-triacetate)

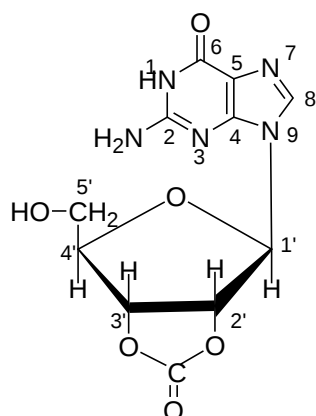
8.6.1.2.2. 当存在高于(假(pseudo))酮的特性基团时,使用正常的取代操作命名法的原则。

例:



3-[4-(甲氨基)-2-氧亚基-1-β-D-核呋喃糖基-1,2-二氢嘧啶-5-基]丙酸

(3-[4-(methylamino)-2-oxo-1-β-D-ribofuranosyl-1,2-dihydropyrimidin-5-yl]propanoic acid)



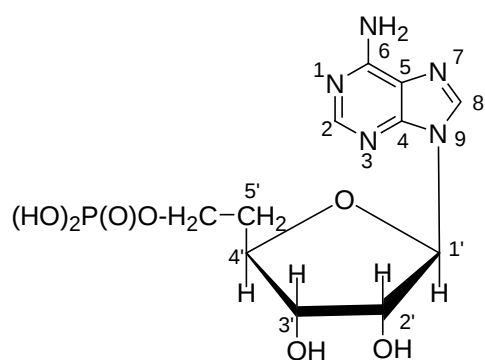
鸟嘌呤核苷环2',3'-碳酸酯 (guanosine cyclic-2',3'-carbonate)

2',3'-双脱氧鸟嘌呤核苷-2',3'-二基碳酸酯 (2',3'-dideoxyguanosine-2',3'-diyl carbonate)

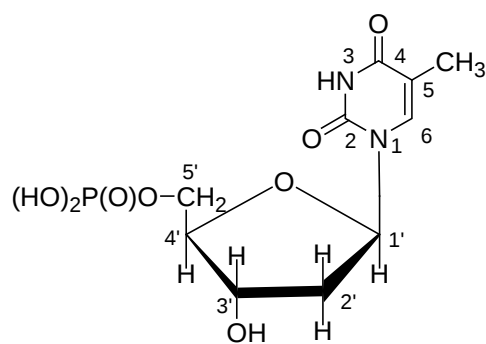
8.6.2. 核苷酸 (Nucleotides)

8.6.2.1. 以下俗名仍保留作为核苷磷酸酯的命名。核糖基上带撇的定位码表示磷酸酯基

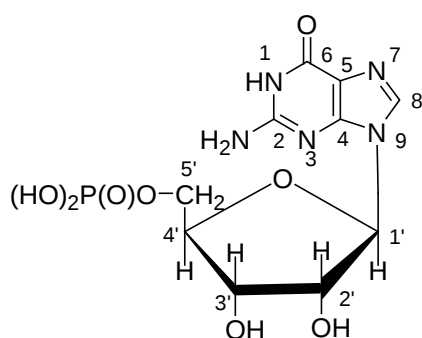
的位置。



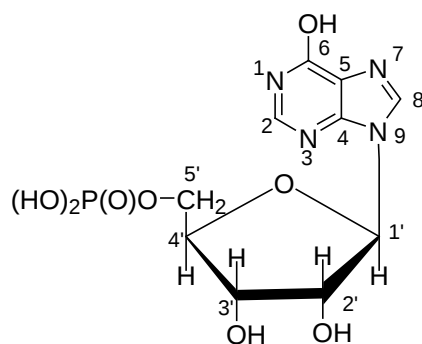
5'-腺苷酸 (5'-adenylic acid)



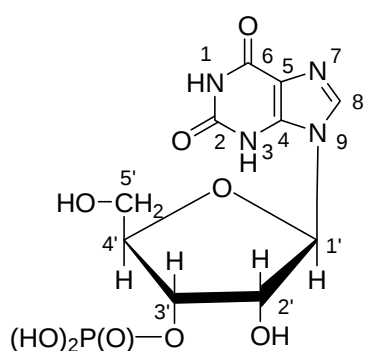
5'-胸苷酸 (5'-thymidylic acid)



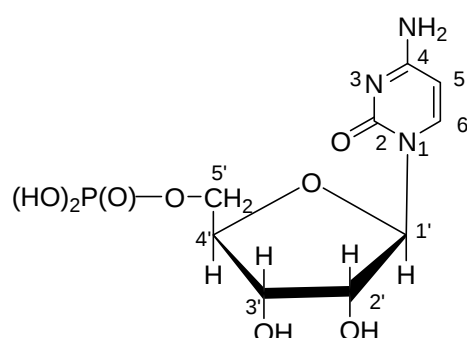
5'-鸟苷酸 (5'-guanylic acid)



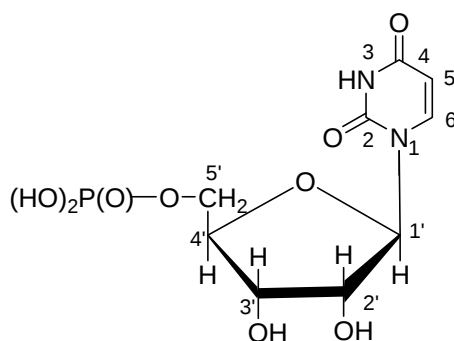
5'-肌苷酸 (5'-inosinic acid)



3'-黄苷酸 (3'-xanthylic acid)



5'-胞苷酸 (5'-cytidylic acid)



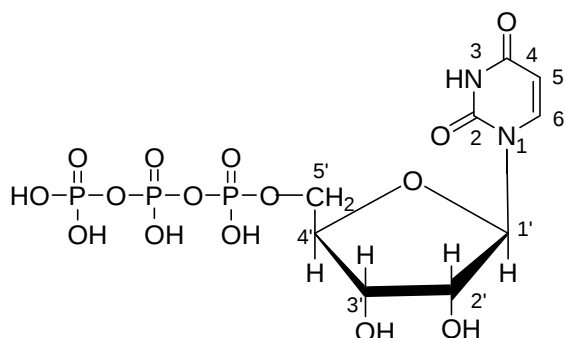
5'-尿苷酸 (5'-uridylic acid)

8.6.2.2. 核苷二磷酸酯与三磷酸酯 (Nucleotide diphosphates and triphosphates)

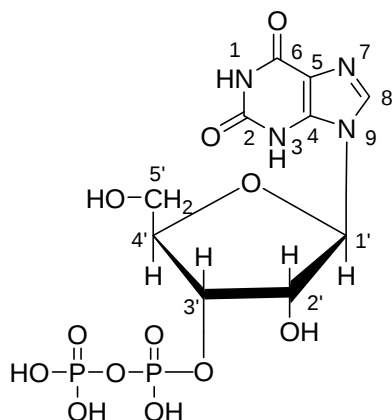
核苷的二磷酸酯、三磷酸酯等等通过在核苷名称后面加短语“二磷酸酯”、“三磷

酸酯”等来命名。分子中二磷酸根、三磷酸根等上游离酸氢原子也须在名称中表明，通常加括号以免混淆。

例：



尿苷 5'-（三磷酸四氢酯）（uridine 5'-(tetrahydrogen triphosphate)）

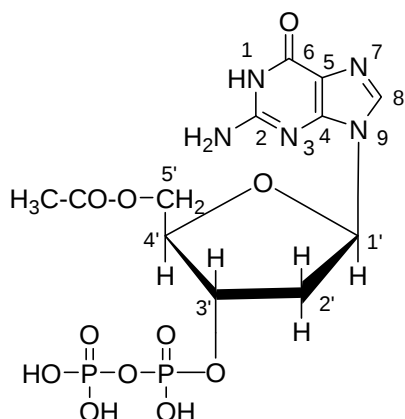


黄苷 3'-（二磷酸三氢酯）（xanthine 3'-(trihydrogen phosphate)）

8.6.2.3. 核苷酸的衍生物（Derivatives of nucleotides）

8.6.2.3.1. 具有俗名的核苷酸的衍生物按照相应核苷的命名方式来命名，即，允许在嘌呤环或嘧啶环上任意取代，而核呋喃糖基部分可如在碳水化合物一节所述的方式进行修饰（见 8.4 节）。核糖部分可以进行 2'- 和 3'- 脱氧修饰。

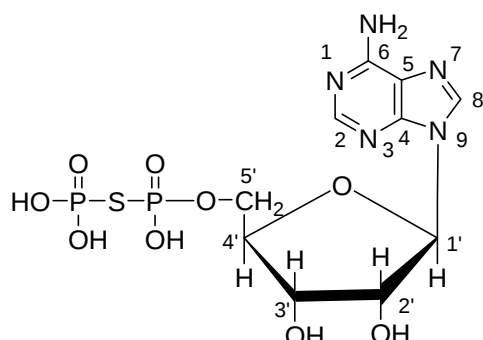
例：



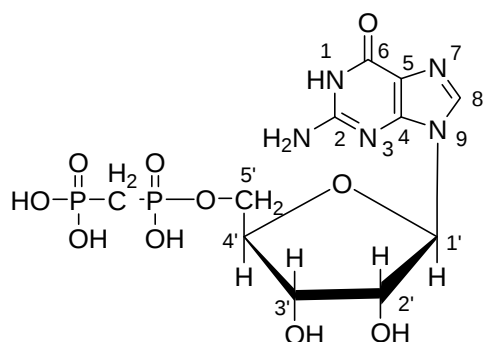
2'-脱氧-5'-O-乙酰鸟苷 3'-(二磷酸三氢酯)
(2'-deoxy-5'-O-acetylguanosine 3'-(trihydrogen diphosphate))

8.6.2.3.2. 核苷二-和多磷酸酯的类似物可通过对二-和多磷酸进行官能团置换法来命名。

例:



腺苷 5'- (2-硫代二磷酸三氢酯) (adenosine 5'-(trihydrogen 2-thiodiphosphate))

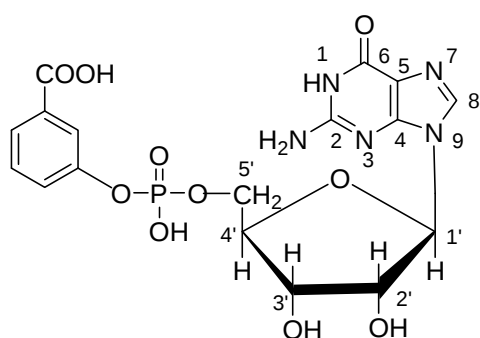


鸟苷 5'-(甲叉基二磷酸三氢酯) (guanosine 5'-(trihydrogen methylenediphosphonate))

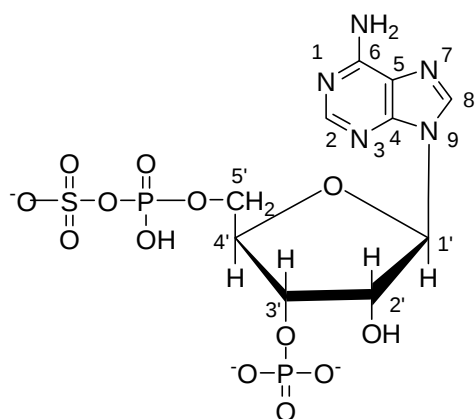
鸟苷 5'- (2-碳杂二磷酸三氢酯) (guanosine 5'-(trihydrogen 2-carbadiphosphate))

8.6.2.3.3. 当存在高于磷酸残基的特性基团时，可应用正常的取代操作命名法。取代的前缀名可从核苷单磷酸的俗名通过将“酸”（‘ic acid’）改为“酰基”（‘yl’）,例如，腺苷酰基(adenylyl)、胞苷酰基(cytidylyl)和次黄苷酰基（肌苷酰基）（inosinylyl）。

例:



3-(5'-鸟苷酰氧基)苯甲酸 (3-(5'-guanylyloxy)benzoic acid)

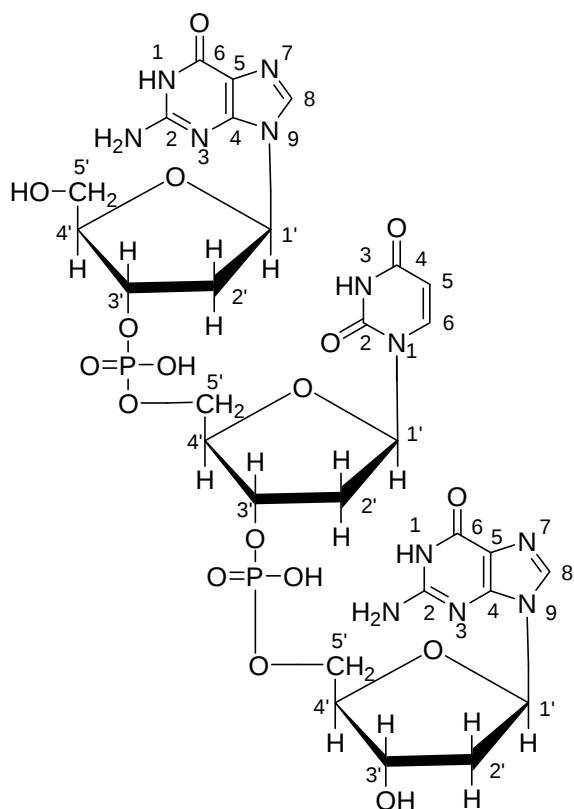


3'-O-磷酰基-5'-腺苷酰硫酸根 (3'-O- phosphonato -5'-adenylyl sulfate)

3'-磷酸根-5'-腺苷酰硫酸根 (3'-phospho-5'-adenylyl sulfate)

8.6.2.3.4. 寡核苷酸使用从核苷酸俗名派生的前缀名来命名。

例：



2'-脱氧鸟苷酰基-(3'→5')-2'-脱氧尿苷酰基-(3'→5')-2'-脱氧鸟苷

(2'-deoxyguanylyl-(3'→5')-2'-deoxyuridylyl-(3'→5')-2'-deoxyguanosine)

8.7. 类脂 (Lipids)

8.7.1. 定义

“类脂”是一个不很严格的术语，指的是一类生物来源的可溶于非极性溶剂的化合物。它们包含可皂化的脂质，如“甘油酯”（脂肪和油），“磷脂”和“糖脂，以及不可皂化的脂质，特别是“甾体类化合物”。本节仅建议作为天然产物的甘油酯、磷脂和糖脂的命名规则，甾体命名见8.3节。

英文甘油酯、磷脂和糖脂的命名法发表于1976年^[8-7-1]，糖脂的命名法在1997 年进行了修正^[8-7-2]。

8.7.2. 甘油酯 (Glycerides)

甘油酯是甘油（丙烷-1, 2, 3-三醇）与脂肪酸形成的酯。按照酰基基团的数目与位置，习惯地又分成甘油三酯、1,2- 或 1,3-甘油二酯和 1- 或 2-甘油单酯。对具体的甘油酯的名称，推荐使用单-、双（二）-或叁（三）-O-酰基甘油（tri-O-acylglycerol）。甘油作为俗名可以使用在一般有机化合物的命名上，但在天然产物领域中它是优先使用的名称。

例：

$$\begin{array}{c} \text{CH}_2\text{-O-CO-(CH}_2\text{)}_{16}\text{-CH}_3 \\ | \\ \text{CH-O-CO-(CH}_2\text{)}_{16}\text{-CH}_3 \\ | \\ \text{CH}_2\text{-O-CO-(CH}_2\text{)}_{16}\text{-CH}_3 \end{array}$$

叁-O-十八酰基甘油，甘油叁十八酸酯（tri-O-octadecanoylglycerol）
叁十八酸丙烷-1,2,3-爪基酯，丙烷-1,2,3-三醇叁十八酸酯（propane-1,2,3-triyl trioctadecanoate）

$$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C-O-CO-CH}_3 \\ \text{2C} \nearrow \\ \text{H}_3\text{C} \text{---} [\text{CH}_2]_7\text{-CO-O-} \text{---} \text{CH}_2 \text{---} \text{CH}_2\text{-O-CO-[CH}_2\text{]}_{14}\text{-CH}_3 \\ \text{1} \quad \text{3} \\ \text{Z} \text{C} \text{=C} \text{H} \\ \text{H} \text{C} \text{---} [\text{CH}_2]_7\text{-CH}_3 \end{array}$$

(2S)-2-O-乙酰基-1-O-十六酰基-3-O-(9Z)-十八碳-9-烯酰基甘油（编号见结构式）
((2S)-2-O-acetyl-1-O-hexadecanoyl-3-O-(9Z)-octadec-9-enoylglycerol)
(2S)-2-O-乙酰基-1-O-油酰-3-O-棕榈酰甘油
((2S)-2-O-acetyl-1-O-oleoyl-3-O-palmitoylglycerol)
(2S)-丙烷-1,2,3-三醇-2-乙酸酯-1-十六酸酯-3-[(9Z)-十八碳-9-烯酸酯]
((2S)-propane-1,2,3-triyl 2-acetate-1-hexadecanoate-3-[(9Z)-octadec-9-enoate])

8.7.3. 磷脂 (Phospholipids)

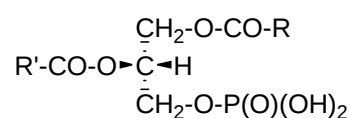
磷脂是含磷酸单酯或二酯的类脂质，包括“磷脂酸（phosphatidic acids）”和其衍生的“甘油磷脂（phosphoglycerides）”以及其它较少见的磷脂如鞘氨醇磷脂（sphingophospholipid）肌醇磷脂（inositolphospholipid）。

磷脂酸是甘油的衍生物，其中甘油的一个羟基（通常是但并非必定是伯羟基）被磷酸酯化，而另外二个羟基则被脂肪酸酯化。

甘油磷脂是磷酸二酯（磷脂酸的酯），在酯化的醇（典型的有2-氨基乙醇、胆碱、甘油、肌醇、丝氨酸）上通常有一个极性头基（-OH 或 -NH₂）。该术语包括“卵磷脂（lecithins）”和“脑磷脂（cephalins）”。

8.7.3.1. 磷脂酸（Phosphatidic acids）

8.7.3.1.1. 磷脂酸的通式如下：

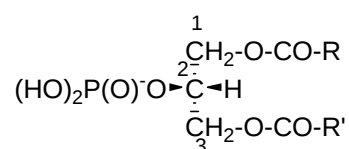


3-*sn*-phosphatidic acid

3-*sn*-磷脂酸

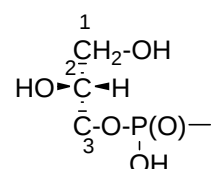
（符号‘*sn*’的讨论和举例见 8.7.3.1.2）

通常，3-*sn*-磷脂酸就简称为磷脂酸。



2-磷脂酸（2-phosphatidic acid）

单价酰基的名称为“磷脂酰”（‘phosphatidyl’，‘*sn*-glycero-3-phospho-’），在一般命名中是一个保留名称。



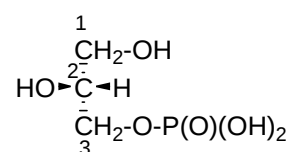
8.7.3.1.2. 磷脂酸的构型（Configuration of phosphatidic acids）

为了确定甘油衍生物的构型，甘油的碳原子需要被立体专一性地（stereospecifically）编号。在Fischer投影式垂直碳链中，在C-2的羟基指向左边的顶端的那个碳原子确定为C-1。

为了与不含立体信息的常规编号区别，使用立体词头‘*sn*’（stereospecifically）

$$\begin{array}{c} 1 \\ \text{CH}_2\text{-O-P(O)(OH)}_2 \\ \text{HO} \rightarrow 2 \text{C} \leftarrow \text{H} \\ \vdots \\ \text{CH}_2\text{-OH} \\ 3 \end{array}$$

磷酸二氢-(2S)-2, 3-二羟基丙(基)酯 ((2S)-2,3-dihydroxypropyl dihydrogen phosphate)
--(系统命名)

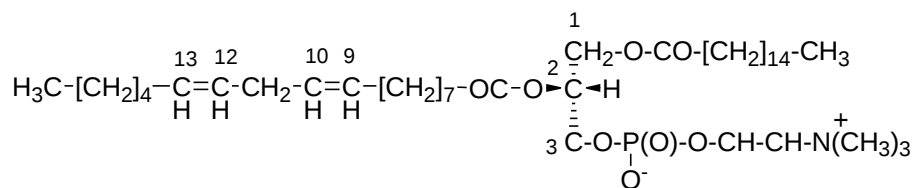
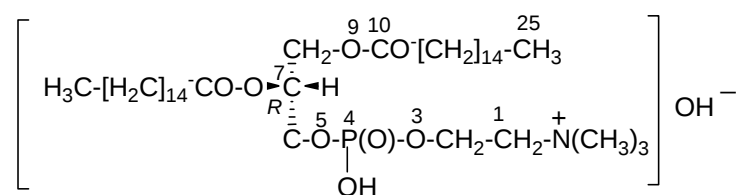


磷酸二氢-(2*R*)-1,2-二羟基丙(基)酯 ((2*R*)-1,2-dihydroxypropyl dihydrogen phosphate)
--(系统命名)

$$\begin{array}{c}
 \text{H}_3\text{C}-[\text{H}_2\text{C}]_{16}-\text{CO}-\text{O}-\overset{\underset{|}{R}}{\overset{\overset{1}{\text{CH}_2-\text{O}-\text{CO}-[\text{CH}_2]_{16}-\text{CH}_3}}{\underset{\underset{3}{\text{CH}_2-\text{O}-\text{P(O)(OH)-O-CH}_2-\overset{\overset{L}{|}}{\underset{\underset{\text{H}}{|}}{\text{N}}}^+\text{NH}_2}}{\text{C}}-\text{H}}}{\text{C}} \\
 2
 \end{array}$$

53

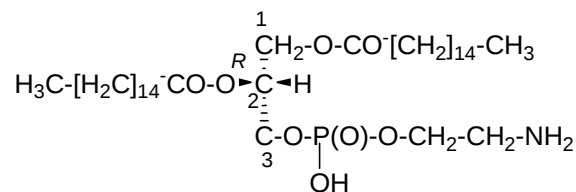
例:

1-hexadecanoyl-2-[(9*z*,12*z*)-octadec-9,12-dienoyl]-*sn*-glycerophosphocholine

8.7.3.2.3. 磷脂酰乙醇胺 (Phosphatidylethanolamine)

“磷脂酰乙醇胺”（更正确的名称是“磷脂酰(氨基)乙醇”）用于描述磷脂酸中的磷酸部分与2-氨基乙醇酯化所产生的酰基衍生物。具体化合物的名称可以俗名磷脂酸（*sn*-甘油-3-磷酸）为母体进行半系统命名或按一般规则进行系统命名。

例：

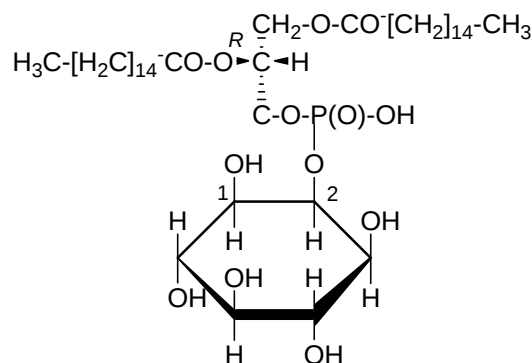


((2*R*)-3-{{(2-aminoethoxy)hydroxyphosphoryl}oxy}propane-1,2-diyl dihexadecanoate)

54

“磷脂酰肌醇”是磷脂酸中的磷酸部分与肌醇酯化所产生的酰基衍生物。具体化合物的名称可以俗名磷脂酸（*sn*-甘油-3-磷酸）为母体进行半系统命名或按一般规则进行系统命名。

例：



1,2-二(棕榈酰基)-*sn*-甘油-3-磷酸-*myo*-肌醇（半系统命名）

(1,2-dipalmitoyl-*sn*-glycero-3-phospho-*myo*-inositol)

(2*R*)-3-[(1*r*,2*R*,3*S*,4*r*,5*R*,6*S*)-(2,3,4,5,6-五羟基环己基)氧基]羟基磷酰基}氧基)丙烷-1,2-叉基 二(十六酸)酯

((2*R*)-3-[(1*r*,2*R*,3*S*,4*r*,5*R*,6*S*)-(2,3,4,5,6-pentahydroxycyclohexyl)oxy]hydroxyphosphoryl}oxy)propane-1,2-diyl dihexadecanoate]

2-*O*-{[(2*R*)-2,3-二(十六酰氧基)丙氧基]羟基磷酰基}-*myo*-肌醇

(2-*O*-{[(2*R*)-2,3-bis(hexadecanoyloxy)propoxy]hydroxyphosphoryl}-*myo*-inositol)

8.7.4. 糖脂 (Glycolipids)

8.7.4.1. 定义

“糖脂”是指如下一组化合物中的任何一种化合物：该化合物含有一个或多个单糖残基，其糖苷键与一个憎水部分[如酰基甘油、鞘氨醇（一种长链脂肪族氨基醇）、神经酰胺（*N*-酰基鞘氨醇）或磷酸异戊二烯酯结合。

“甘油糖脂”是含有一个或多个甘油残基的糖脂。

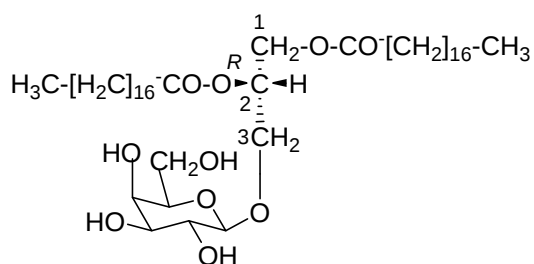
“鞘糖脂”是含有至少一个单糖残基和一个鞘氨醇或神经酰胺的类脂质。

“糖磷脂酰肌醇”是指其分子中的糖通过糖苷键与磷脂酰肌醇的肌醇部分连接的一类糖脂。

8.7.4.2. 甘油糖脂 (Glycoglycerolipids)

具体的化合物在母体甘油的基础上命名，其构型的确定如 8.7.3.1.2 所述。

例：



3-O-β-D-吡喃半乳糖基-1,2-二-O-十八酰基-*sn*-甘油

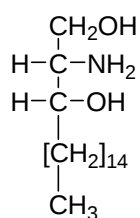
(3-O-β-D-galactopyranosyl-1,2-di-O-octadecanoyl-*sn*-glycerol)

(2*R*)-3-(O-β-D-吡喃半乳糖基)丙烷-1,2-二基 二(十八酸)酯

((2*R*)-3-(O-β-D-galactopyranosyl)propane-1,2-diyl dioctadecanoate)

8.7.4.3. 鞘糖脂 (Glycosphingolipids)

8.7.4.3.1 鞘糖脂的名称由保留名称俗名“鞘氨醇烷” (sphinganine) (指具有下述绝对构型的脂肪族氨基醇) 形成。此名称来自天然产物鞘氨醇 (shingosine), 是4-位双键饱和的鞘氨醇。“鞘氨醇烷”的系统名称为(2*S*,3*R*)-2-氨基十八烷-1,3-二醇。

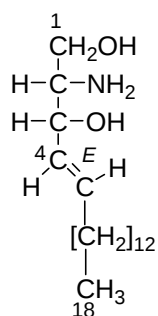


鞘氨醇烷 (sphinganine)

(2*S*,3*R*)-2-氨基十八烷-1,3-二醇 ((2*S*,3*R*)-2-aminooctadecane-1,3-diol)

保留名称俗名鞘氨醇烷可用作命名时的官能性母体, 用来形成不饱和和衍生物的名称。其他衍生物如羟基、氧亚基和氨基衍生物以及具有不同链长的异构体或者其他非对映异构体则也可以此为母体进行命名, 或按照取代命名法的原则、规则和惯例来系统地命名。

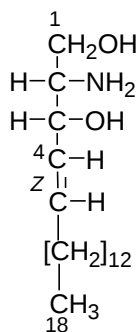
例:



鞘氨醇 (shingosine) (俗名)

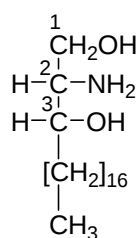
(4*E*)-鞘氨醇-4-烯 ((4*E*)-sphing-4-enine) (半系统命名)

(2*S*,3*R*,4*E*)-2-氨基十八碳-4-烯-1,3-二醇 ((2*S*,3*R*,4*E*)-2-aminooctadec-4-ene-1,3-diol) (系统命名)



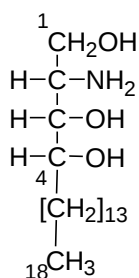
(4Z)-鞘氨醇-4-烯 ((4Z)- sphing-4-ene) (半系统命名)

(2S,3R,4Z)-2-氨基十八碳-4-烯-1,3-二醇 ((2S,3R,4Z)-2-aminooctadec-4-ene-1,3-diol) (系统命名)



二十碳鞘氨醇烷 (Icosasphinganine) (半系统命名)

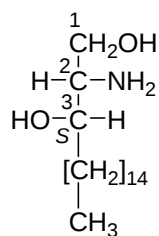
(2S,3R)-2-氨基二十烷-1,3-二醇 ((2S,3R)-2-aminoicosane-1,3-diol) (系统命名)



植物鞘氨醇 (phytosphingosine) (俗名)

(4S)-4-羟基鞘氨醇烷 ((4S)-4-hydroxysphinganine) (半系统命名)

(2S,3S,4R)-2-氨基-1,3,4-十八烷三醇 ((2S,3S,4R)-2-amino-1,3,4-octadecanetriol) (系统命名)



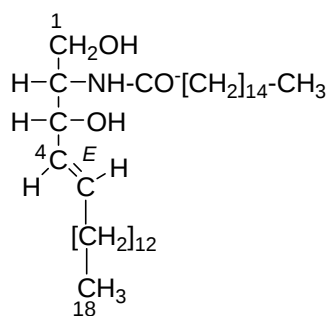
(3S)-鞘氨醇烷 ((3S)-sphinganine) (半系统命名)

(2S,3S)-2-氨基十八烷-1,3-二醇 ((2S,3S)-2-aminooctadecane-1,3-diol) (系统命名)

8.7.4.3.2. 神经酰胺 (Ceramides)

神经酰胺是N-酰化的鞘氨醇。

例:



N-十六酰基鞘氨醇 (*N*-hexadecanoylsphingosine) (俗名)

(4*E*)-*N*-十六酰基鞘氨醇-4-烯 ((4*E*)-*N*-hexadecanoylsphing-4-ene) (半系统命名)

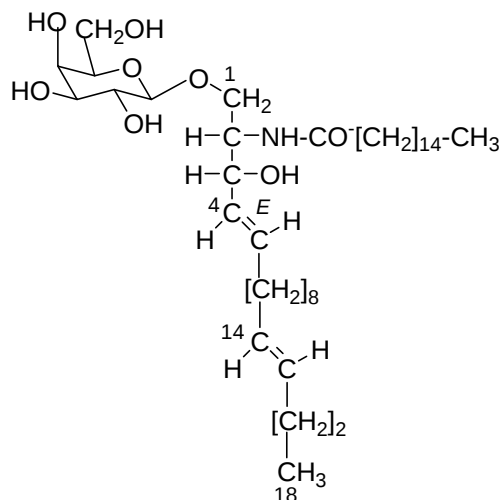
N-[(2*S*,3*R*,4*E*)-1,3-二羟基十八碳-4-烯-2-基]十六酰胺

(*N*-[(2*S*,3*R*,4*E*)-1,3-dihydroxyoctadec-4-en-2-yl]hexadecanamide) (系统命名)

8.7.4.3.3. 中性鞘糖脂 (Neutral glycosphingolipids)

中性鞘糖脂是含有鞘氨醇或神经酰胺衍生物的碳水化合物。碳水化合物的残基通过糖苷键连接到1-*O*-。系统命名要包括全部位次编号。

例:



N-十六酰基-1-*O*-β-*D*-半乳糖基-4*E*,14*E*-鞘氨醇-4,14-二烯

(*N*-(hexadecanoyl)-1-*O*-β-*D*-galactosyl-4*E*,14*E*-sphingadienine) (半系统命名)

N-[(2*S*,3*R*,4*E*,14*E*)-1-(β-*D*-半乳吡喃糖基氧基)-3-羟基十八碳-4,14-二烯-2-基]十六酰胺

(*N*-[(2*S*,3*R*,4*E*,14*E*)-1-(β-*D*-galactopyranosyloxy)-3-hydroxyoctadeca-4,14-dien-2-yl]hexadecanamide) (系统命名)

参考文献

[8-7-1] International Union of Biochemistry and Molecular Biology, 'Biochemical Nomenclature and Related Documents', Portland Press Ltd, London (1992). See 'Nomenclature of Lipids' (Recommendations 1976), 180-190

[8-7-2] International Union of Pure and Applied Chemistry, International Union of

Biochemistry and Molecular Biology, Joint Commission on Biochemical Nomenclature, 'Nomenclature of Glycolipids Recommendations, 1997', *Pure Appl. Chem.*, **69**, 2475-2487 (1997).

第9章 同位素丰度改变化合物 (Isotopically modified compounds)

有机化合物中所含元素的同位素组成与自然界中不同时,对他们的命名就需要在原命名的基础上加以专门的标识,根据 IUPAC 对各种不同类型同位素丰度改变而建议的规则体系,对中文命名现提出以下的相应建议。美国化学文摘社 (Chemical Abstract Service) 索引命名体系中采用了 Boughton 建议^[9-1]基础上发展出的另一同位素丰度改变化合物的命名体系,对此中文命名建议中未予采用。

9.1. 符号和定义

9.1.1. 核素符号

同位素丰度改变的化合物分子式或命名中所涉及核素的符号由元素的原子符号和元素符号左上标表示核素质量数的阿拉伯数字两部分组成。

9.1.2. 原子符号

核素符号中的元素符号即 IUPAC 无机化学命名中的原子符号。在核素符号中,原子符号为罗马字体,斜体的原子符号则按有机化学命名习惯仍保留为位次标识时用。

注:氢的同位素氕、氘和氚分别用核素符号 ^1H , ^2H 和 ^3H 表示,也可以用符号 D 和 T 分别表示 ^2H 和 ^3H ,但是如果同时有其他丰度改变的核素存在时,则不能使用,因为这将使同位素标识时,按字母排序核素变得困难。尽管按照 Boughton 体系(见上)命名时仍用 *d* 和 *t* 代替 ^2H 和 ^3H ,但在其他场合都不采用小写字母来作为原子符号。因此,Boughton 体系范围外,均不再推荐 *d* 和 *t* 用于化学命名。

按 IUPAC 的建议^[9-2]各种氢原子和其离子名称如下表:

	原子 (atom)	正离子 (cation)	负离子 (anion)
	H	H^+	H^-
^1H	氕(pie) (protium)	氕核, 质子 (proton)	氕化物 (protide)
^2H	氘(dao) (deuterium)	氘核 (deuteron)	氘化物 (deuteride)
^3H	氚(chuan) (tritium)	氚核 (triton)	氚化物 (tritide)
H (天然)	氢 (hydrogen)	氢核, 氢正离子 (hydron)	氢化物 (hydride)

9.1.3. 天然同位素丰度化合物

同位素丰度未变的化合物的组成是宏观的,它核素成分的比例和自然界中一样。它的分子式和命名按常规写法。

例:

CH_4 甲烷 (Methane)

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ 乙醇 (Ethanol)

9.1.4. 同位素丰度改变化合物

同位素丰度改变化合物的宏观组成中至少有一种元素的核素比例和自然界中的不一样。同位素丰度改变的化合物分为同位素取代(9.2)和同位素标记(9.3)两种。同位素标记的化合物又分为特定标记(9.3.1)、选择性标记(9.3.2)、非选择性标记(9.3.3), 或贫同位素标记(9.3.4)。

9.2. 同位素取代的化合物

同位素取代的化合物实际上是化合物中所有的分子中只有被标记出来的核素是被取代的, 其余所有没有被标记的核素都是天然丰度核素。

9.2.1. 分子式

同位素取代的化合物分子式的写法除使用相应的核素符号外和平常一样。 同一个化合物同一个位置被不同的同位素取代时, 它们的符号按质量递增的顺序排列如 $\text{CH}_3\text{-CH}^2\text{H-OH}$, 不是 $\text{CH}_3\text{-C}^2\text{HH-OH}$ 。.

9.2.2. 命名

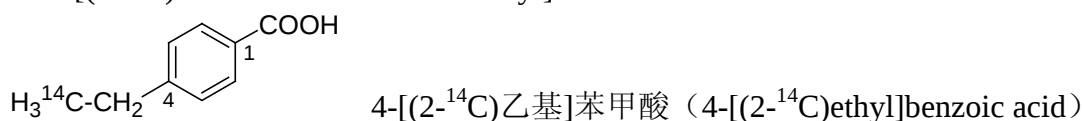
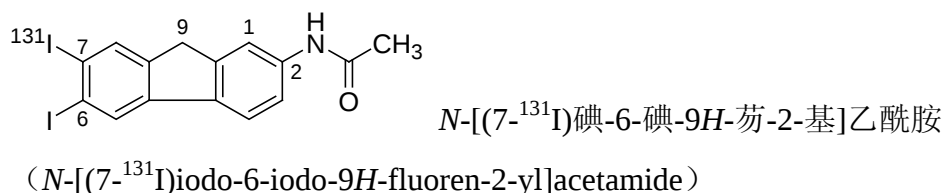
同位素取代的化合物的命名是在化合物名称或最好是在化合物名称中被取代的部分之前插入一个括号说明取代情况, 括号中取代的位次表示在前面, 取代的核素在后面。

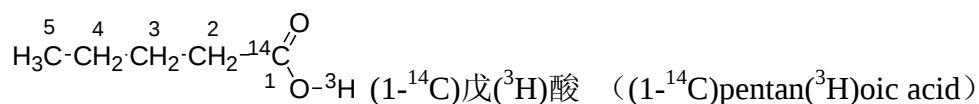
例:

$^{13}\text{CH}_4$ (^{13}C)甲烷 ((^{13}C)Methane)

$\text{CH}_3\text{-CH}^2\text{H-OH}$ ($1\text{-}^2\text{H}_1$)乙醇 (($1\text{-}^2\text{H}_1$)Ethanol)

$^{12}\text{CHCl}_3$ (^{12}C)氯仿 ((^{12}C)Chloroform)





9.3. 同位素标记的化合物

同位素标记的化合物是一个同位素丰度未改变的化合物和一个或多个类似同位素取代的化合物的混合物。

注：尽管同位素标记的化合物就化学特性而言是真的混合物(和丰度未改变的化合物一样)，但为了命名，这些混合物被称为同位素标记的化合物。

9.3.1. 特定标记化合物

当一个特定的同位素取代的化合物形式上加到类似的，但同位素丰度未变的化合物中时，所得的化合物被称为特定同位素标记的化合物。在这种情况下，被标记核素的位置和数目都是确定的。

9.3.1.1 特定标记的化合物的结构式的写法和平常一样，但要加一个方括号说明被标记的核素符号，以及如是多个时的个数下标。

例：

同位素取代的化合物	加至同位素丰度未改变的化合物	产生的特定标记的化合物
$^{13}\text{CH}_4$	CH_4	$[\text{}^{13}\text{C}]\text{H}_4$
$\text{CH}_2\text{}^2\text{H}_2$	CH_4	$\text{CH}_2[\text{}^2\text{H}_2]$
$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{}^{18}\text{OH}$	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-}[\text{}^{18}\text{O}]\text{H}$
$\text{CH}^2\text{H}_2\text{-CH}_2\text{-O}^2\text{H}$	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$	$\text{CH}[\text{}^2\text{H}_2]\text{-CH}_2\text{-O}[\text{}^2\text{H}]$

注：尽管特定标记化合物的分子式不代表整个样品(极大部分是同位素丰度未改变的化合物)的组成，但他表示出了最令人感兴趣的同位素取代化合物的存在。

当同位素取代的化合物只有一个同位素丰度改变的原子时，特定标记的化合物是单标记的，如 $\text{CH}_3\text{-CH}[\text{}^2\text{H}]\text{-OH}$ ；当同位素取代的化合物在同一个位置或不同位置同一个元素不止一个原子被取代时，特定标记化合物是多重标记的，如 $\text{CH}_3\text{-C}[\text{}^3\text{H}_2]\text{-OH}$ 和 $\text{CH}_2[\text{}^2\text{H}]\text{-CH}[\text{}^2\text{H}]\text{OH}$ ；当同位素取代的化合物不止一种原子同位素丰度被改变时，特定标记化合物为混合标记，如 $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-}[\text{}^{18}\text{O}][\text{}^2\text{H}]$ 。

9.3.1.2. 特定标记的化合物命名是在化合物的名称或化合物名称中同位素丰度改变的部分之前插入一个方括号，标明该核素的符号，并冠以必要的位次。如果可能进行多重标记，被标记的原子数目要在相应的元素符号后面用下标表示，甚至在单标记的情况下也必须。这是区分特定标记和选择性或非选择性标记化合物所必须的。

例：

$[^{13}\text{C}]\text{H}_4$ $[^{13}\text{C}]$ 甲烷 ($[^{13}\text{C}]\text{Methane}$)

$\text{CH}_3[{}^2\text{H}]$ $[{}^2\text{H}_1]$ 甲烷 ($[{}^2\text{H}_1]\text{Methane}$)

$\text{C}[{}^2\text{H}_2]\text{Cl}_2$ 二氯 $[{}^2\text{H}_2]$ 甲烷 ($\text{Dichloro}[{}^2\text{H}_2]\text{methane}$)



9.3.2. 选择性标记化合物

选择性标记化合物是同位素取代的化合物和同位素丰度未改变化合物的混合物, 这里的同位素取代的化合物中被标记的核素的位置是确定的, 但数目是不确定的。选择性标记的化合物可以看作是特定标记化合物的混合物。

选择性标记化合物可以有二种类型: (a) 多重标记, 当一个同位素丰度未改变的化合物中, 发生同位素改变之处有超过一个的相同原子, 如 CH_4 中的 H; 或者化合物不同部位处若干数目的同一元素发生同位素丰度的改变, 如 $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}$ 中的 C。(b) 混合标记, 当化合物中有不止一个被标记的核素, 如 $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$ 中的 C 和 O。

9.3.2.1. 选择性标记化合物不能用一个确定的结构分子式来表示, 因此在通常的分子式前, 或必要时在具有独立编号那部份的分子式前, 加方括号, 括号内所有必要的位次标识(数字和/或字母)在前, 核素符号在后, 省略复数数字下标。同一核素有相同位次编号时, 写一个而不重复。当有多个标记核素存在时, 按它们元素符号的字母顺序排列, 如果元素符号一样则按质量递增的顺序排列。

例:

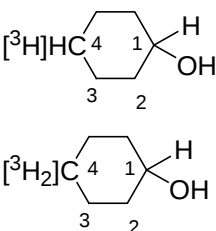
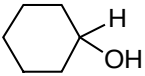
同位素取代的化合物的混合物	加至同位素丰度未改变的化合物	产生的选择性标记的化合物
CH_3^2H , CH_2^2H_2 , CH^2H_3 , C^2H_4 任意两种或多种的混合物	CH_4	$[{}^2\text{H}]\text{CH}_4$

注: 当化合物用分子式而不是结构式表示时上面的规则也适用, 如 $[{}^2\text{H}]\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$ 。

9.3.2.2. 选择性标记化合物的命名组成和特定标记化合物基本一样, 但在原子符号后的复数下标通常省略。同一位次上的同一元素不用重复标出。选择性标记化合物命名和相应的同位素取代化合物命名不同的地方是核素描述参数用方括号而不是圆括号括起, 重

复的同一位次和复数下标要省略。

例：

同位素取代化合物的混合物	加至同位素丰度未改变的化合物	这时的命名为
CH_3^2H , CH_2^2H_2 , CH^2H_3 , C^2H_4	CH_4	$[\text{}^2\text{H}]$ 甲烷 ($[\text{}^2\text{H}]$ Metanhe) 不是 $[\text{}^2\text{H}_4]$ 甲烷 ($[\text{}^2\text{H}_4]$ Methane)
$\text{CH}_3\text{-CH}^2\text{H-OH}$, $\text{CH}_3\text{-C}^2\text{H}_2\text{-OH}$	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$	$[1\text{-}^2\text{H}]$ 乙醇 ($[1\text{-}^2\text{H}]$ Ethanol) 而不是 $[1,1\text{-}^2\text{H}_2]$ 乙醇 ($[1,1\text{-}^2\text{H}_2]$ Ethanol)
		$[4\text{-}^3\text{H}]$ 环己醇 ($[4\text{-}^3\text{H}]$ Cyclohexanol) 而 不是 $[4,4\text{-}^3\text{H}_2]$ 环己醇 ($[4,4\text{-}^3\text{H}_2]$ Cyclohexanol)

将几种已知的同位素取代化合物和同位素丰度未改变的类似化合物混合得到的选择性标记化合物中，每个位置上被标记核素的数量或可能数量必须在相应的核素符号后面用下标表示出来。同一个核素符号后两个或更多的下标之间用分号号隔开。对多重标记或混合标记的化合物而言，将其当作为不同的同位素取代化合物时同样的顺序依次排列。其中下标 0 表示形成混合物中同位素取代化合物之一在所指位置上同位素丰度未改变。

例：

同位素取代化合物的混合物	加至同位素丰度未改变的化合物	产生的选择性标记的化合物
$\text{CH}_2^2\text{H-CH}_2\text{-OH}$, $\text{CH}^2\text{H}_2\text{-CH}_2\text{-OH}$	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$	$[2\text{-}^2\text{H}_{1;2}]$ $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$ $[2\text{-}^2\text{H}_{1;2}]$ 乙醇 ($[2\text{-}^2\text{H}_{1;2}]$ Ethanol)
$\text{CH}^2\text{H}_2\text{-CH}_2\text{-OH}$, $\text{CH}^2\text{H}_2\text{-CH}_2\text{-}^{18}\text{OH}$	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$	$[2\text{-}^2\text{H}_{2;2}, ^{18}\text{O}_{0;1}]$ $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$ $[2\text{-}^2\text{H}_{2;2}, ^{18}\text{O}_{0;1}]$ 乙醇 ($[2\text{-}^2\text{H}_{2;2}, ^{18}\text{O}_{0;1}]$ Ethanol)

9.3.3. 非选择性标记化合物

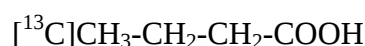
当被标记的核素的位置和数量都不确定时，此同位素标记化合物称为非选择性标记化合物。

注：当化合物中同一个位置上只有一个元素的原子同位素丰度有改变时只能得到特定或

选择性标记化合物。非选择性标记要求结构中同位素丰度有改变的元素是在不同的位置，例如 CH_4 和 $\text{CCl}_3\text{-CH}_2\text{-CCl}_3$ 只能用氢的同位素特定标记或选择性标记(见 9.3.1.3 和 9.3.2.1)。

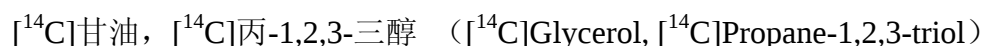
9.3.3.1. 非选择性标记分子式是在线性分子式前面加上一个方括号，括号中是核素符号，不需要位次标识和标识取代数量的下标。

例：



9.3.3.2. 非选择性标记化合物的命名组成和选择性标记化合物一样，但描述参数中不包含位次标识和下标。

例：



9.3.4. 贫同位素化合物

当同位素标记化合物中某一个或多个原素的同位素含量低于天然丰度时为贫同位素化合物。

9.3.4.1. 贫同位素化合物分子式的表示方法是在相关的核素符号前面加上“*def*”且无需连字符。

例：



注：也有人认为可以用 $[\text{def}^{12}\text{C}]\text{CHCl}_3$ 表达。

9.3.4.2. 贫同位素化合物的命名是在相应化合物名称或化合物名称中同位素丰度改变部分前面加上一个方括号，括号中为斜体字节“*def*”及相应的核素符号，之间不用连字符。

例：



表 9-1 同位素丰度改变化合物的分子式及命名对照表

化合物类型	分子式	命名
丰度未改变的化合物	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$	乙醇 (Ethanol)
同位素取代的化合物	$\text{C}^2\text{H}_3\text{-CH}_2\text{-O}^2\text{H}$	(2,2,2- $^2\text{H}_3$)乙(^2H)醇

		(2,2,2- ² H ₃)Ethan(² H)ol) (O,2,2,2- ² H ₄)乙醇 (O,2,2,2- ² H ₄)Ethanol)
特定标记化合物	C[² H ₃]-CH ₂ -O[² H]	(2,2,2- ² H ₃)乙(² H)醇 (2,2,2- ² H ₃)Ethan[² H]-ol) [O,2,2,2- ² H ₄]乙醇 ([O,2,2,2- ² H ₄]Ethanol)
选择性标记化合物	[O,2- ² H]CH ₃ -CH ₂ -OH [2- ² H _{2;2} , ¹⁸ O _{0;1}]CH ₃ -CH ₂ -OH	[O,2- ² H]乙醇 ([O,2- ² H]Ethanol) [2- ² H _{2;2} , ¹⁸ O _{0;1}]乙醇 [2- ² H _{2;2} , ¹⁸ O _{0;1}]Ethanol
非选择性标记化合物	[² H]CH ₃ -CH ₂ -OH	[² H]乙醇 ([² H]Ethanol)
贫同位素化合物	[def ¹³ C]CH ₃ -CH ₂ -OH	[def ¹³ C]乙醇 ([def ¹³ C]Ethanol)

参考文献

[9-1] Boughtton, W. A. *Science*, **1934**, 80, 86-89.

[9-2] *Pure Appl. Chem.*, **1988**, 60, 1115-1116.

全国科学技术名词审定委员会 中国化学会

化学名词审定委员会

有机化合物命名审定委员会

有机化合物命名原则

2010 年推荐版

(第五稿)

详细目录

引言

第 1 章 有机化合物名称构词概要 (Conventions in Nomenclature of Organic Compounds)

1.1. 构词基本形式

1.2. 中文有机化合物名称中的连缀字和前、后缀字

1.2.1. 中文有机化合物名称中的连缀字

1.2.1.1. ‘化’

1.2.1.2. ‘代’ (‘替’)

1.2.1.3. ‘杂’

1.2.1.4. ‘合’

1.2.1.5. ‘并’

1.2.1.6. ‘缩’

1.2.2. 中文有机化合物名称中的前缀字

1.2.2.1. ‘联’

1.2.2.2. ‘聚’

1.2.2.3. ‘脱 (去, 失, 降)’

1.2.2.4. ‘增 (高, 加, 扩, 升)’

1.2.2.5. ‘环’

1.2.2.6. ‘断’ (开)

1.2.2.7. ‘迁 (移)、逆’

1.2.2.8. ‘正、异、新、仲、叔’

1.2.2.9. ‘顺, 反, (对) 映’

1.2.2.10. ‘邻, 间, 对, 迫’

1.2.3. 中文有机化合物名称词根中的后缀字

1.2.3.1. 基

1.2.3.2. 叉基和亚基

1.2.3.3. 爪基和次基

1.2.3.4. 自由基

1.2.3.5. 根

1.3. 有机化合物名称用数字和符号

1.3.1. 阿拉伯数字

1.3.2. 中文数字、天干和其它量词、顺序字

1.3.2.1. 中文数字

1.3.2.2. 单、双和大写中文数字

1.3.2.3. 天干

1.3.2.4. 伯、仲、叔、季

1.3.3. 斜体拉丁字母和字节

- 1.3.3.1. 小写斜体拉丁字母
- 1.3.3.2. 大写斜体元素符号
- 1.3.3.3. 斜体字节和其它字母
- 1.3.4. 希腊字母
- 1.3.5. 标点符号
 - 1.3.5.1. 逗号
 - 1.3.5.2. 句号（小圆点）
 - 1.3.5.3. 冒号
 - 1.3.5.4. 连接号
 - 1.3.5.5. 括号
 - 1.3.5.5.1. 圆括号（小括号）
 - 1.3.5.5.2. 方括号（中括号）
 - 1.3.5.5.3. 大括号
- 1.4. 有机化合物名称构词中的基本术语
 - 1.4.1. 母体结构（parent structures）
 - 1.4.1.1. 母体氢化物（parent hydride）
 - 1.4.1.2. 官能性母体（functional parent）
 - 1.4.2. 基团（groups）
 - 1.4.2.1. 取代原子或取代基团（substituent atom or group）
 - 1.4.2.2. 特性基团（characteristic group）
 - 1.4.2.3. 主体基团（principal group）
 - 1.4.3. 有机化合物名称类术语
 - 1.4.3.1. 俗名
 - 1.4.3.2. 半系统命名名或半俗名
 - 1.4.3.3. IUPAC 系统命名名
 - 1.4.3.3.1. 取代名（Substitutive name）
 - 1.4.3.3.2. 官能团类别名（Functional class name）
 - 1.4.3.3.3. 取代基—官能团类别定名名（Radicalfunctional name）
 - 1.4.3.3.4. 并合名（Fusion name）
 - 1.4.3.3.5. Hantzsch-Widman 命名名（Hantzsch-Widman name）
 - 1.4.3.3.6. 置换名（Replacement name）
 - 1.4.3.3.7. 缀合名（conjunctive name）
 - 1.4.3.3.8. 加合名（additive name）
 - 1.4.3.3.9. 减脱名（subtractive name）
 - 1.4.3.3.10. 多重名（multiplicative name）
 - 1.4.3.4. 其它系统命名名
 - 1.4.4. 本建议中使用的一些其它术语
 - 1.4.4.1. 高位（Seniority, senior）
 - 1.4.4.2. 最低（小）位次组（Lowest set of locants）
 - 1.4.4.3. 成键数（Bonding number）

第 2 章 有机化合物命名通则（General Principles of Organic Nomenclature）

2.1. 成键数（Bonding number）

2.2. 命名操作方法 (Nomenclature operation)

2.2.1. 取代操作法 (Substitutive operation)

2.2.2. 置换操作法 (Replacement operation)

2.2.2.1. 使用连缀字 ‘杂’

2.2.2.2. 使用连缀字 ‘代’ (‘替’)

2.2.3. 加合操作法 (Additive operation)

2.2.3.1. 使用连缀字

2.2.3.1.1. 使用连缀字 ‘化’

2.2.3.1.2. 使用连字符 (—)

2.2.3.2. 使用前缀字

2.2.3.2.1. 使用前缀字 ‘增 (高, 加, 扩, 升)’

2.2.3.2.2. 使用前缀字 ‘联’

2.2.3.3. 使用后缀字

2.2.3.4. 不用连缀字直接加合

2.2.3.4.1. 中性母体结构名加官能团类名

2.2.3.4.2. 母体氢化物基名加官能团类名

2.2.3.4.3. 串联取代基名构词法

2.2.4. 缀合操作法 (Conjunctive operation)

2.2.4.1. 不用连缀字直接缀合

2.2.4.2. 使用前缀字 ‘联’

2.2.5. 减脱操作法 (Subtractive operation)

2.2.5.1. 使用前缀字 ‘脱 (去, 失, 降)’

2.2.5.2. 改变后缀

2.2.6. 环开闭操作法 (Ring formation or cleavage)

2.2.6.1. 使用前缀字 ‘环’

2.2.6.2. 使用前缀字 ‘断’ (开)

2.2.7. 重排操作法 (Rearrangement)

2.2.7.1. 使用前缀字 ‘迁’

2.2.7.2. 使用前缀字 ‘逆’

2.2.8. 复合操作法 (Multiplicative operation)

2.2.8.1. 涉及二或多价取代基组合体的命名

2.2.8.2. 具对称二或多价取代基时的命名

2.2.8.3. 同一结构单元组合体衍生物的命名

2.2.9. 并合操作法 (Fusion operation)

2.3. 额外氢的标注 (Indicated hydrogen)

第 3 章 母体氢化物以及由此形成的取代基 (Parent Hydrides and Their Derived Substituent Groups)

3.1. 有机化合物中的基元氢化物

3.2. 无环多核氢化物

3.2.1. 无环烃

3.2.2. 除烃和硼烷外的无环均一氢化物

- 3.2.3. 杂链氢化物
 - 3.2.3.1. 含杂原子的碳链
 - 3.2.3.2. 二种杂原子的奇数交替链
- 3.3. 单环氢化物
 - 3.3.1. 单环烃
 - 3.3.1.1. 饱和单环烃
 - 3.3.1.2. 无取代的含最大非累积双键数的单环不饱和烃（轮烯）
 - 3.3.1.3. 俗名单环烃
 - 3.3.2. 除烃和硼烷外的单环均一氢化物
 - 3.3.3. 除硼烷外的含杂原子单环氢化物
 - 3.3.3.1. Hantzsch-Widman 杂环命名系统
 - 3.3.3.2. 采用俗名的含杂原子单环母体氢化物
 - 3.3.3.3. 按置换法命名含杂原子单环母体氢化物
 - 3.3.3.4. 二种杂原子交替成环的命名
- 3.4. 俗名和半系统命名的多环母体氢化物
 - 3.4.1. 饱和多环烃母体氢化物
 - 3.4.2. 不饱和多环烃
 - 3.4.3. 杂环母体氢化物
- 3.5. 并（稠）环（多环）母体氢化物
 - 3.5.1. 并环组分的环系（Ring systems used as components）与并环组成环系的高位顺序（Priority order of component ring systems）
 - 3.5.1.1. 碳氢环组分（Hydrocarbon components）
 - 3.5.1.2. 杂环组份（Heterocyclic components）
 - 3.5.1.3. 并环组成环系的高位顺序（Priority order of component ring systems）
 - 3.5.2. 并环名称的构词（Construction of fusion names）
 - 3.5.2.1. 环组份的选择（Selection of component(s)）
 - 3.5.2.2. 主体环组份的选择（Selection of parent component(s)）
 - 3.5.2.3. 拼合体环组份的选择（Selection of attached component(s)）
 - 3.5.2.4. 并环命名构词时前缀排列顺序（Order of citation of fusion prefixes）
 - 3.5.3. 并环命名构词时并合位置的标识（Fusion Descriptors）
 - 3.5.3.1. 并环中主体环组份周边的标识
 - 3.5.3.2. 并环中拼合体环组份周边的位次标识
 - 3.5.3.3. 一级拼合体与主体并合的标识
 - 3.5.3.4. 拼合体进一步并合时的位次标识
 - 3.5.3.5. 并合位置标识的省略
 - 3.5.3.6. 并环组份中杂原子位次的标识
 - 3.5.3.7. 并环命名中相同拼合体的处理
 - 3.5.4. 编号（Numbering）
 - 3.5.4.1. 并环系的画法
 - 3.5.4.2. 并环系图形的排列取向
 - 3.5.4.3. 并环周边原子编号
 - 3.5.4.4. 并环内部原子编号（Interior numbering）
 - 3.5.5. 带桥的并环体系（Bridged fused ring systems）

- 3.5.5.1. 带桥的并环体系中基本并环和桥的选择
- 3.5.5.2. 带桥并环体系中桥的命名
- 3.5.5.3. 带桥并环体系的命名
- 3.5.5.4. 带桥并环体系中桥原子的编号
- 3.6. 桥环（多环）母体氢化物
 - 3.6.1. 定义和术语
 - 3.6.2. 双环桥环母体碳氢化物
 - 3.6.2.1. 命名
 - 3.6.2.2. 位次编号
 - 3.6.3. 多环桥环母体碳氢化物
 - 3.6.3.1. 多环桥环母体碳氢化物命名的进一步规则
 - 3.6.3.2. 多环桥环母体碳氢化物命名中二级桥的编号
 - 3.6.4. 被修饰桥环体系（杂环、不饱和环、有立体构型的环等）的命名
 - 3.6.4.1. 杂原子置换后的编号
 - 3.6.4.2. 带主体官能团后的编号
 - 3.6.4.3. 带重键时的编号
 - 3.6.4.4. 带取代基时的编号
- 3.7. 螺环（多环）母体氢化物
 - 3.7.1. 单环组成的螺环母体氢化物
 - 3.7.1.1. 两个单环组成的单螺母体氢化物
 - 3.7.1.2. 单环组成的未分叉多螺母体氢化物
 - 3.7.1.3. 单环组成的分叉多螺母体氢化物
 - 3.7.1.4. 三个单环和一个螺原子所组成环系（如六价螺原子）
 - 3.7.1.5. 单环组成螺环体系中存在杂原子、特性基团（官能团）、取代基时的编号规则
 - 3.7.2. 含多环体系螺环母体氢化物
 - 3.7.2.1. 含有两个相同多环组分的单螺化合物
 - 3.7.2.2. 含有不同组分环且至少一个多环的单螺化合物
 - 3.7.2.3. 含有至少两个不同组分且至少一个为多环的不分叉多螺化合物
 - 3.7.2.4. 含有一个或一个以上多环组分环螺联至同一组分上的分叉多螺化合物
 - 3.7.2.5. 含有一个或一个以上多环组分环螺联至非同一组分上的分叉多螺化合物
- 3.8. 联环（Ring assemblies）母体氢化物
 - 3.8.1. 相同环系的联环母体氢化物
 - 3.8.1.1. 两个相同环系的联环母体氢化物
 - 3.8.1.2. 三或三以上个相同环系不分叉的联环母体氢化物
 - 3.8.2. 不同环系的联环母体氢化物
- 3.9. 蕃（Phanes）母体氢化物
 - 3.9.1. 定义和术语
 - 3.9.2. 蕃母体命名的组成
 - 3.9.2.1. 蕃的简化骨架名
 - 3.9.2.2. 蕃的扩展前缀
 - 3.9.2.3. 超原子位次和扩展体接合位置位次

- 3.9.2.4. 蕃母体氢化物的编号
- 3.9.3. 蕃命名中杂原子置换, 额外氢, 氢化程度和官能性母体的命名法
 - 3.9.3.1. 含杂原子的蕃母体氢化物置换命名法
 - 3.9.3.2. 蕃母体氢化物中额外氢, 氢化程度以及词尾烯炔的命名方法
 - 3.9.3.3. 蕃官能性母体的命名法
- 3.10. 天然产物母体氢化物
- 3.11. 由母体氢化物衍生的取代基命名

第4章 特性基团 (官能(基)团) (Characteristic (Functional) Groups)

- 4.1. 不饱和基团 (Unsaturation)
 - 4.1.1. 命名含重键结构的后缀
 - 4.1.2. 命名中加氢的前缀
 - 4.1.3. 命名中脱氢的前缀
 - 4.1.4. 饱和/去饱和后母体氢化物衍生的取代基命名
- 4.2. 特性基团 (Specification of characteristic groups)
 - 4.2.1. 前缀和后缀
 - 4.2.1.1. 特性基团
 - 4.2.1.2. 离子和自由基中心
 - 4.2.2. 官能团的修饰基团
- 4.3. 官能性母体化合物和衍生的取代基 (functional parent compounds and derived substituent group)
- 4.4. 官能团置换

第5章 命名实施导引 (Guide to Name Construction)

- 5.1. 命名通则
- 5.2. 命名时用作后缀特性基团 (主体基团) 的确定
- 5.3. 命名时用作词根的母体氢化物的确定
 - 5.3.1. 无环化合物中母体氢化物 (主链) 的确定
 - 5.3.2. 环系化合物中命名时用作词根母体氢化物 (主环系) 的确定
 - 5.3.3. 环-链化合物中命名时用作词根母体氢化物的确定
- 5.4. 命名化合物中原子和基团位次的编号
 - 5.4.1. 化合物命名中位次编号插入的位置
 - 5.4.2. 化合物母体结构的编号
 - 5.4.3. 化合物母体结构上取代基的编号
- 5.5. 命名化合物中前缀排列顺序
 - 5.5.1. 不可分开前缀的排列顺序
 - 5.5.2. 可分开前缀的排列顺序
 - 5.5.3. 立体词头的排列顺序

第6章 各类化合物的命名 (Application to Specific Classes of Compounds)

6.1. 卤素、硝基、亚硝基、偶氮、重氮、叠氮化合物 (Halogen, nitro, nitroso, azo, diazo and azido compounds)

6.1.1. 卤素化合物 (halogen compounds)

6.1.2. 硝基和亚硝基化合物 (nitro, and nitroso compounds)

6.1.3. 偶氮, 偶氮氧, 重氮, 以及有关化合物 (azo, azoxy, diazo, and related compounds)

6.1.3.0. 乙氮烯(diazenes)

6.1.3.1. 偶氮化合物 (azo compounds)

6.1.3.2. 偶氮氧化合物(azoxy compounds)

6.1.3.3. 重氮正离子化合物(diazonium compounds)

6.1.3.4. 有通用结构 $R-N=N-X$ 偶氮化合物

6.1.3.5. 重氮化合物(diazo compounds)

6.1.4. 叠氮化合物(azides)

6.1.5. 异乙氮烯 (isodiazene)

6.2. 胺和亚胺 (Amines and imines)

6.2.1. 伯胺 (Primary amines)

6.2.2. 仲胺和叔胺 (Secondary and tertiary amines)

6.2.3. 亚胺 (Imines)

6.2.4. 羟胺 (Hydroxyamines)

6.2.5. 胺氧化物 (Amino oxides)

6.3. 羟基化合物及其衍生物、类似物 (Hydroxy compounds, their derivatives and analogues)

6.3.1. 羟基化合物和类似物

6.3.1.1. 醇和酚 (Alcohols and phenols)

6.3.1.2. 醇和酚的硫、硒、碲类似物 (Sulfur, selenium, and tellurium analogues of alcohols and phenols)

6.3.2. 由醇、酚及其类似物衍生而来的取代基前缀

6.3.3. 由醇、酚及其类似物衍生而来的盐 (Salts)

6.3.4. 醚和硫属类似物 (Ether and chalcogen analogues)

6.3.4.1. 取代法名称

6.3.4.2. 官能团类别法名称

6.3.4.3. 置换命名

6.3.4.4. 环醚

6.3.5. 氢过氧化物和过氧化物 (Hydroperoxides and peroxides)

6.3.6. 氢多硫化物和多硫化物 (Hydropolysulfides and polysulfides)

6.3.7. 亚砷、砷和它们的类似物 (Sulfoxides, sulfones, and their analogues)

6.4. 醛、酮及其衍生物、类似物 (Aldehydes, ketones, their derivatives and analogues)

- 6.4.1. 醛, 硫醛, 及其类似物 (aldehydes, thioaldehydes, and their analogues)
- 6.4.2. 酮, 硫酮, 及其类似物 (ketones, thioketones, and their analogues)
 - 6.4.2.1. 酮 (ketones)
 - 6.4.2.2. 酮类硫属类似物(chalcogen analogues of ketones)
- 6.4.3. 烯酮 (Ketenes)
- 6.4.4. 缩醛, 半缩醛, 酰基缩醛, 及其类似物 (acetals, hemiacetals, acylals, and their analogues)
 - 6.4.4.1. 缩醛 (Acetals)
 - 6.4.4.2. 半缩醛 (Hemiacetals)
 - 6.4.4.3. 酰基缩醛 (Acylacetals)
- 6.4.5. 偶姻 (Acyloins)
- 6.4.6. 羰基化合物的氮衍生物 (nitrogenous derivatives of carbonyl compounds)
 - 6.4.6.1. 肟 (Oximes)
 - 6.4.6.2. 腙 (Hydrazones)
 - 6.4.6.3. 双腙 (Azines)
 - 6.4.6.4. 羰基化合物的其它氮衍生物(Other nitrogenous derivatives of carbonyl compounds)
- 6.5. 酸及其相关的特性基团 (Acids and related characteristic groups)
 - 6.5.1 羧酸
 - 6.5.1.1 简单 (未取代) 的链状一元酸、二元酸
 - 6.5.1.2 取代羧酸
 - 6.5.1.2.1 含羟基、烷氧基、氧亚基的羧酸
 - 6.5.1.2.2 酰胺酸和酰苯胺酸 (Amic and anilic acids)
 - 6.5.1.2.3 氨基酸 (Amino acids)
 - 6.5.1.3 羧酸基团的修改
 - 6.5.1.3.1 过氧酸 (Peroxy acids)
 - 6.5.1.3.2 亚氨酸 (Imidic acid)、腙酸 (Hydrazoneic acid)、羟肟酸 (hydroxamic acid)
 - 6.5.1.3.3 羟氨酸 (Hydroxamic acids)
 - 6.5.1.3.4 硫代羧酸和硫代碳酸 (Thiocarboxylic, thiocarbonic acids)
 - 6.5.2. 含有硫属原子直接与有机基团相连的硫属酸
 - 6.5.2.1. 含有硫属原子直接与有机基团相连的硫属酸
 - 6.5.2.2. 含有硒原子直接与有机基团相连的硒酸
 - 6.5.3. 含有磷原子或砷原子直接与有机基团相连的磷氧酸或砷氧酸
 - 6.5.3.1. 含有五价磷原子直接与某个有机基团相连的的磷氧酸 (膦酸, 次膦酸) 及其置换物
 - 6.5.3.2. 含有五价砷原子直接与某个有机基团相连的砷氧酸 (胂酸, 次胂酸) 及其置换衍生物
 - 6.5.4. 盐和酯
 - 6.5.4.1. 盐
 - 6.5.4.2. 酯
 - 6.5.5. 内酯、内酰胺、内亚氨酸及其类似物 (Lactones, lactams, lactims, and analogues)
 - 6.5.5.1. 内酯

- 6.5.5.2. 磺内酯 (Sultones)
- 6.5.5.3. 内酰胺和内亚氨酸
- 6.5.5.4. 磺内酰胺 (Sultams)
- 6.5.6 酰卤化合物 (Acid halides)
- 6.5.7. 酸酐及其类似物 (Anhydrides and their analogues)
 - 6.5.7.1 对称的酸酐
 - 6.5.7.2 不对称(混合)酸酐
 - 6.5.7.3 酸酐的硫属类似物
- 6.5.8 酰胺、酰亚胺及酰肼 (Amides, imides and hydrazides)
 - 6.5.8.1 氮的单酰基衍生物
 - 6.5.8.2 氮的对称的二酰基或三酰基衍生物
 - 6.5.8.3. 二酰亚胺 (Imides)
 - 6.5.8.4 酰肼 (Hydrazides)
- 6.5.9 腈、异腈及其相关化合物 (Nitriles, isocyanides and related compounds)
 - 6.5.9.1 腈 (Nitriles)
 - 6.5.9.2 与氰化物相关的化合物
 - 6.5.9.3. 腈氧化物 (Nitrile oxides)
- 6.6. 14~16 族元素有机化合物和金属有机化合物 (Organic compounds of the Group 14~16 and organometallic compounds)
 - 6.6.1. 14族元素母体氢化物
 - 6.6.1.1. 14族元素的烃类似物
 - 6.6.1.2. 杂混硅母体氢化物
 - 6.6.2. 15族元素的氢化物
 - 6.6.2.1. 氮氢化物的衍生物
 - 6.6.2.2. 三价磷、砷、锑、铋的有机衍生物
 - 6.6.2.3. 五价磷、砷、锑、铋的母体氢化物
 - 6.6.3. 16族元素的氢化物
 - 6.6.3.1. 单一16族元素的母体氢化物及其衍生的取代基
 - 6.6.3.2. 混合16族元素的母体氢化物及其衍生的取代基
 - 6.6.4. 有机金属化合物
 - 6.6.4.1. 锑、铋、锗、锡和铅金属有机化合物
 - 6.6.4.2. 金属仅与氢和有机基团的碳相连的金属有机化合物
 - 6.6.4.3. 带负离子配体的金属有机化合物
 - 6.6.4.4. 与碳原子以多中心键连的金属有机化合物
- 6.7. 自由基和离子 (Radicals and ions)
 - 6.7.1. 自由基
 - 6.7.1.1. 一价自由基
 - 6.7.1.2. 二价和三价自由基
 - 6.7.1.3. 特性基团上的自由基中心
 - 6.7.2. 正离子

- 6.7.3. 负离子
- 6.7.4. 同一个结构中的正离子和负离子中心
- 6.7.5. 自由基离子

第7章 立体化学 (Stereochemical Specification)

7.1. 引言

- 7.1.1. 分子“手性”
- 7.1.2. 关于“旋光性”
- 7.1.3. 关于前手性和前立体异构现象
- 7.1.4. 立体异构源因素 (stereogenic unit, stereogen, stereoelements)

7.2. 立体化学中三维结构的构型图像表达方式

- 7.2.1. 立体化学构型的结构图表达
- 7.2.2. 立体化学构型的透视图和投影图表达
 - 7.2.2.1. Fischer 投影法
 - 7.2.2.2. Haworth 式
 - 7.2.2.3. Newman 投影法
 - 7.2.2.4. 锯木架形式
 - 7.2.2.5. 锯齿形式

7.3. 手性化合物的构型表示法

- 7.3.1. 用D, L 或其它俗名表示
- 7.3.2. 按CIP优先系统 (CIP priority system) 的构型表示法
 - 7.3.2.1. “顺序规则” (Sequence rule)
 - 7.3.2.1.1. 双向图 (digraph) —“顺序规则”的应用
 - 7.3.2.1.2. 复制原子和假想原子 (duplicate atom and phantom atom)
 - 7.3.2.2. 手性中心构型的标识
 - 7.3.2.3. 手性轴构型的标识
 - 7.3.2.4. 手性面构型的标识
 - 7.3.2.5. 相对构型的标识方法
- 7.3.3. CIP 优先系统使用过程中的弱点
- 7.3.4. 综合应用各种系统描述化合物构型

7.4. 双键类异构体标识

- 7.4.1. 双取代双键构型标识
- 7.4.2. 三或四取代双键构型标识

7.5. 环状化合物异构体标识

- 7.5.1. 环状化合物的顺、反异构体标识
- 7.5.2. 饱和并环化合物异构体标识
 - 7.5.2.1. 饱和并环化合物的*cis*、*trans* 异构体
 - 7.5.2.2. 饱和多环并环化合物
- 7.5.3. 桥环化合物表达相对构型方式

第 8 章 天然产物 (Natural Products)

8.1. 生物碱 (alkaloids)

8.1.1. 吡咯烷类 (Pyrrolidines)

8.1.1.1. 吡咯烷类 (pyrrolidines)

8.1.1.2. 异萼金刚大碱类 (Croomines)

8.1.1.3. 百部新碱类 (Stemoninines)

8.1.1.4. 原百部碱类 (Protostemonines)

8.1.2. 莨菪碱类 (Tropane alkaloids)

8.1.3. 六氢吡咯嗪类 (吡咯里西啶类) (Pyrrolizidines)

8.1.3.1. 六氢吡咯嗪类 (吡咯里西啶类) (Pyrrolizidines)

8.1.3.2. 千里光烷类 (senecionan)

8.1.4. 哌啶类 (Piperidines)

8.1.5. 八氢吲哚嗪[类]生物碱 (吲哚里西啶类) (Indolizidines)

8.1.5.1. 八氢吲哚嗪类 (octahydroindolizines) 吲哚里西啶类 (indolizidine)

8.1.5.2. 菲并吲哚嗪[类]生物碱 (菲并吲哚里西啶类) (Phenanthroindolizidines)

8.1.5.3. 一叶萩碱类 (Securines)

8.1.6. 八氢喹啉[类]生物碱 (喹诺里西啶类) (Quinolizidines)

8.1.6.1. 八氢喹啉[类]生物碱 (octahydroquinolizines)

8.1.6.2. 金雀花碱类 (Cytisines)

8.1.6.3. 鹰爪豆碱类 (Sparteines)

8.1.6.4. 苦豆碱类 (Aloperines)

8.1.6.5. 苦参碱类 (Matrines)

8.1.6.6. 石松碱类 (Lycopodines)

8.1.7. 吡啶酮类 (Acridinones)

8.1.8. 苯丙胺类 (Phenylpropylamines)

8.1.9. 苄基四氢异喹啉类 (Benzyltetrahydroisoquinolines)

8.1.9.1. 苄基四氢异喹啉 (Benzyltetrahydroisoquinoline)

8.1.9.2. 双苄基四氢异喹啉类 (Bisbenzyltetrahydrosisoquinolines)

8.1.9.2.1. 小蘖胺烷类 (berbamans)

8.1.9.2.2. 氧卡萨烷类 (oxyacanthans)

8.1.9.2.3. 筒箭碱类 (tubocurans)

8.1.9.2.4. 罗地辛碱类 (Rodiasine)

8.1.9.3. 吗啡碱类 (Morphines)

8.1.9.4. 莲花烷碱类 (Hasubanonines)

8.1.9.5. 阿朴菲碱类 (Aporphines)

8.1.9.6. 原小蘖碱类 (Protoberberines)

8.1.9.7. 原托品类 (普罗托品类) (Protopines)

8.1.9.8. 苯并菲啶碱类 (Benzophenanthridines)

8.1.9.9. 丽春花碱类 (Rhoeadines)

8.1.10. 苯乙基四氢异喹啉类 (Phenethyltetrahydroisoquinolines)

8.1.10.1. 秋水仙碱类 (Colchicines)

8.1.10.2. 粗榧碱类 (Cephalotaxines)

- 8.1.10.3. 刺桐碱类 (Erythrines)
- 8.1.10.4. 高刺桐碱类 (Homoerythrines)
- 8.1.11. 苳基苳乙胺类 (Benzylphenethylamines)
 - 8.1.11.1. 石蒜碱类 (Lycorines)
 - 8.1.11.2. 石蒜伦碱类 (Lycorenines)
 - 8.1.11.3. 文殊兰碱类 (Crinines)
 - 8.1.11.4. 加兰他敏类 (Galanthamines)
- 8.1.12. 吐根碱类 (Emetines)
- 8.1.13. 半萜吲哚碱类 (Semiterpenoid indoles) (麦角生物碱(Ergot alkaloids))
- 8.1.14. 单萜吲哚碱类 (Monoterpenoid indole alkaloids)
 - 8.1.14.1. 长春花生物碱类 (文可生碱类) (Vincosines)
 - 8.1.14.2. 柯南因碱类 (Corynantheines)
 - 8.1.14.3. 老刺木碱类 (Vobasine alkaloids)
 - 8.1.14.4. 1, 16-环柯南烷类 (1, 16-cyclocorynans)
 - 8.1.14.5. 瓦来西亚碱类 (Vallesiachotamines)
 - 8.1.14.6. 氧杂育亨宾碱类 (Oxayohimbines)
 - 8.1.14.7. 育亨宾碱类 (Yohimbines)
 - 8.1.14.8. 沙巴精类 (Sarpagines)
 - 8.1.14.9. 阿枯米林类 (Akuammilines)
 - 8.1.14.10. 阿马林类 (萝芙木碱类) (Ajmalines)
 - 8.1.14.11. 康狄卡品碱类 (Condylocarpan alkaloids)
 - 8.1.14.12. 阿枯米辛碱类 (Akuammicines)
 - 8.1.14.13. 钩藤碱类 (Rhynchophyllines)
 - 8.1.14.14. 台湾钩藤碱类 (Formosanines)
 - 8.1.14.15. 钩吻碱类 (Gelsemines)
 - 8.1.14.16. 伊波鲁顿碱类 (Iboluteines)
 - 8.1.14.17. 花冠木碱类 (Stemmadenines)
 - 8.1.14.18. 士的宁碱类 或 番木鳖碱类 (Strychnines)
 - 8.1.14.19. 白坚木碱类 (Aspidospermines)
 - 8.1.14.20. 白坚木替宁类 (Aspidofractinines)
 - 8.1.14.21. 文朵灵宁碱类 (Vindolinines)或环白坚木碱类(Cycloaspidospermidines)
 - 8.1.14.22. 伊波南生物碱类 (Eburnas)
 - 8.1.14.23. 文卡明碱类 (Vincamines)
 - 8.1.14.24. 白雀胺碱类 (Quebrachamines)
 - 8.1.14.25. 依波加明碱类 (Ibogamines)
 - 8.1.14.26. 克里瓦明碱类(Cleavamines)
 - 8.1.14.27. 塔卡明碱类 (Tacamines)
 - 8.1.14.28. 土布洛生碱类 (Tubulosines)
 - 8.1.14.29. 喜树碱类 (Camptothecinines)
 - 8.1.14.30. 奎宁碱类 (Cinchonines)
- 8.1.15. 倍半萜生物碱类 (Sesquiterpenoid alkaloids)
 - 8.1.15.1. 石斛碱类 (Dendrobines)
- 8.1.16. 二萜生物碱类 (Diterpenoid alkaloids)
 - 8.1.16.1. 乌头碱类 (Aconitines)

- 8.1.16.2. 阿替生类 (Atisines)
- 8.1.16.3. 光翠雀碱类 (Denudatines)
- 8.1.16.4. 海替定类 (Hetidines)
- 8.1.16.5. 海替生类 (Hetisines)
- 8.1.16.6. 欧乌头碱类 (Napellines)
- 8.1.17. 三萜生物碱类(Triterpenoid alkaloids)或虎皮楠碱类(*Daphniphyllum* alkaloids)
 - 8.1.17.1. 虎皮楠碱类 (交让木碱类) (Daphniphyllines)
 - 8.1.17.2. 育瑞利碱类 (Yuzurines)
 - 8.1.17.3. 育瑞利明碱类 (Yuzurimines)
- 8.1.18. 甾体生物碱 (Steroidal alkaloids)
 - 8.1.18.1. 孕甾烷胺类 (Pregnan-amines)
 - 8.1.18.2. 地麻素类甾体生物碱 (Conanine alkaloids)
 - 8.1.18.3. 藜芦碱类 (Veratramines)
 - 8.1.18.4. 维藜芦碱类 (Veralkamines)
 - 8.1.18.5. 茄啶类生物碱 (Solanidine alkaloids)
 - 8.1.18.6. 螺茄碱类 (Spirosolanidines)
 - 8.1.18.7. 西藜芦碱类 (Cevanines)
- 8.1.19. 嘌呤类 (Purines)
- 8.2. 萜类 (terpene)
 - 8.2.1 单萜 (monoterpenoids)
 - 8.2.1.1. 无环单萜 (acyclic monoterpenoids)
 - 8.2.1.2. 单环单萜
 - 8.2.1.2.1. 环丙烷单萜 (cyclopropane monoterpenoids)
 - 8.2.1.2.2. 戊环并吡喃单萜 (iridoid monoterpenoids)
 - 8.2.1.2.3. 环己碳环单萜 (cyclohexane monoterpenoid)
 - 8.2.1.3. 二环单萜
 - 8.2.1.3.1. 蒎烷类 (pinane)
 - 8.2.1.3.2. 樟烷类 (莰烷类) (camphane, bornane)
 - 8.2.1.3.3. 葑烷类(fenchane)
 - 8.2.1.3.4. 萆(kai)烷类(carane)
 - 8.2.1.3.5. 桉(zhu)烷类 (侧柏烷类) (thujane)
 - 8.2.2. 倍半萜
 - 8.2.2.1. 无环倍半萜
 - 8.2.2.1.1. 金合欢烷类(法呢烷类) (farnesanes)
 - 8.2.2.2. 单环倍半萜
 - 8.2.2.2.1. 环金合欢烷类 (cyclofarnesane)
 - 8.2.2.2.2. 没药烷类 (bisabolane)
 - 8.2.2.2.3. 吉玛烷类 (germacrane)
 - 8.2.2.2.4. 榄烷型 (elemene)
 - 8.2.2.2.5. 葎草烷类 (humulane)
 - 8.2.2.3. 二环倍半萜
 - 8.2.2.3.1. 杜松烷类 (cadinanes)

- 8.2.2.3.2. 桉烷类 (eudesmanes)
- 8.2.2.3.3. 佛术烷类 (eremophilanes)
- 8.2.2.3.4. 二环金合欢烷类 (辛辣木烷类) (drimanes)
- 8.2.2.3.5. 苦味毒烷类 (picrotoxanes)
- 8.2.2.3.6. 伊鲁达烷类 (illudalanes)
- 8.2.2.3.7. 绿苔烷类 (pinguisanes)
- 8.2.2.3.8. 喜马偕尔烷类 (himachalanes)
- 8.2.2.3.9. 愈创木烷类 (guaianes)
- 8.2.2.3.10. 异胡萝卜烷类 (isodaucanes)
- 8.2.2.3.11. 胡萝卜烷类 (daucanes)
- 8.2.2.3.12. 乳菇烷类 (lactaranes)
- 8.2.2.3.13. 石竹烷型 (caryophyllanes)
- 8.2.2.3.14. 菖蒲烷型 (acoraness)
- 8.2.2.3.15. 花柏烷类 (chamigranes)
- 8.2.2.3.16. 樟树烷类 (campherenanes)
- 8.2.2.3.17. β -檀香烷类 (β -santalanes)
- 8.2.2.4. 三环倍半萜
 - 8.2.2.4.1. 樱草烷类 (hirsutanes)
 - 8.2.2.4.2. 雪松烷类 (cedranes)
 - 8.2.2.4.3. 异雪松烷类 (isocedranes)
 - 8.2.2.4.4. 前深冬烷类 (prezizaanes)
 - 8.2.2.4.5. 深冬烷类 (zizaane)
 - 8.2.2.4.6. 原伊鲁烷类 (protoilludanes)
 - 8.2.2.4.7. 伊鲁烷类 (illudanes)
 - 8.2.2.4.8. 马瑞斯姆烷类 (marasmanes)
 - 8.2.2.4.9. 异乳菇烷类 (isolactaranes)
 - 8.2.2.4.10. 罗汉柏烷类 (thujopsanes)
 - 8.2.2.4.11. 马兜铃烷类 (aristolanes)
 - 8.2.2.4.12. 草澄茄烷类 (cubebanes)
 - 8.2.2.4.13. 广藿香烷类 (patchoulanes)
 - 8.2.2.4.14. 长蕨烷类 (longipinanes)
 - 8.2.2.4.15. 长叶烷类 (longifolanes)
 - 8.2.2.4.16. α -檀香烷 (α -santalanes)
- 8.2.3. 二萜
 - 8.2.3.1. 无环和单环二萜 (acyclic and monocyclic diterpenes)
 - 8.2.3.1.1. 植物烷类 (phytanes)
 - 8.2.3.1.2. 烟草烷类 (cembranes)
 - 8.2.3.2. 双环二萜
 - 8.2.3.2.1. 半日花烷类 (labdanes)
 - 8.2.3.2.2. 克罗烷类 (clerodanes)
 - 8.2.3.2.3. 西松烷类 (casbanes)
 - 8.2.3.2.4. 海兔烷类 (dolabellanes)
 - 8.2.3.2.5. 假白榄烷类 (jatrophanes)
 - 8.2.3.3. 三环二萜

- 8.2.3.3.1. 松香烷类 (abietanes)
- 8.2.3.3.2. 海松烷类 (pimaranes)
- 8.2.3.3.3. 罗汉松烷类 (podocarpanes)
- 8.2.3.3.4. 玫瑰烷类 (rosanes)
- 8.2.3.3.5. 桃拓烷类 (tataranes)
- 8.2.3.3.6. 卡山烷类 (cassanes)
- 8.2.3.3.7. 瑞香烷类 (daphnanes)
- 8.2.3.3.8. 紫杉烷类 (taxanes)
- 8.2.3.4. 四环二萜
 - 8.2.3.4.1. 贝壳杉烷类 (kauranes)
 - 8.2.3.4.2. 贝叶烷类 (beyeranes)
 - 8.2.3.4.3. 阿替生烷类 (atisane)
 - 8.2.3.4.4. 巴豆烷类 (tiglianes)
 - 8.2.3.4.5. 巨大戟烷类 (ingenanes)
 - 8.2.3.4.6. 木藜芦毒烷类 (grayanotoxanes)
 - 8.2.3.4.7. 赤霉烷类 (gibberellanes)
 - 8.2.3.4.8. 异戊烯基倍半萜类二萜
- 8.2.4. 二倍半萜
- 8.2.5. 三萜
 - 8.2.5.1. 无环三萜
 - 8.2.5.2. 单环、二环和三环三萜
 - 8.2.5.2.1. 鸢尾醛类 (iridals) 三萜
 - 8.2.5.2.2. 龙涎香烷类 (ambranes) 三萜
 - 8.2.5.3. 甾烷型 (gonane) 四环三萜
 - 8.2.5.3.1. 原萜烷型 (protostane)
 - 8.2.5.3.2. 达玛烷类 (dammaranes)
 - 8.2.5.3.3. 大戟烷类 (euphanes)
 - 8.2.5.3.4. 变构甘遂烷类 (apotirucallanes)
 - 8.2.5.3.5. 羊毛甾烷类 (lanostanes)
 - 8.2.5.3.6. 环木菠萝烷类 (cycloartanes)
 - 8.2.5.3.7. 葫芦萜烷类 (cucurbitanes)
 - 8.2.5.4. 五环三萜
 - 8.2.5.4.1. 羽扇豆烷类 (lupanes)
 - 8.2.5.4.2. 齐墩果烷类 (oleananes, -amyranes)
 - 8.2.5.4.3. 乌索烷类 (ursanes)
 - 8.2.5.4.4. 木栓烷类 (friedelanes)
 - 8.2.5.4.5. 何帕烷类 (hopanes)
 - 8.2.5.4.6. 羊齿烷类 (fernanes)
 - 8.2.5.4.7. 伽马腊烷类 (gammaceranes)
- 8.2.6. 四萜 胡萝卜素类 (carotenes)

8.3. 甾体 (steroids)

- 8.3.1. 雌甾烷类
- 8.3.2. 雄甾烷类
- 8.3.3. 孕甾烷类
- 8.3.4. 胆酸烷类
- 8.3.5. 其它C-17 位不同碳链甾体类型
- 8.3.6. C-17位连杂环边链的甾体类型
- 8.4. 糖（醣）（carbohydrates）
 - 8.4.1 糖命名的基本规则
 - 8.4.2. 链状单糖 (monosaccharide)的命名
 - 8.4.2.1. 单糖的命名
 - 8.4.2.2. 高碳糖的命名
 - 8.4.3. 环状单糖的命名
 - 8.4.3.1. 环状结构的Fischer 投影式表示法
 - 8.4.3.2. 环状结构的Haworth 表示法
 - 8.4.3.3. 环状结构的Mills 表示法
 - 8.4.4. 单糖衍生物的命名
 - 8.4.4.1. 去氧糖 (Deoxy sugars)命名
 - 8.4.4.2. 氨基糖的命名
 - 8.4.4.3. 硫代糖的命名
 - 8.4.4.4. 其它取代单糖的命名
 - 8.4.4.5 不饱和糖的命名
 - 8.4.4.6. 糖醇命名
 - 8.4.4.7. 糖酸或糖醛酸命名
 - 8.4.4.8. O-取代衍生物的命名
 - 8.4.4.9. 糖苷的命名
 - 8.4.4.10. 卤代糖
 - 8.4.5. 寡糖 (Oligosaccharides)及多糖(polysaccharide)
 - 8.4.5.1. 寡糖及多糖书写方式
 - 8.4.5.2. 寡糖的命名
 - 8.4.5.3. 多糖的命名
- 8.5. 氨基酸和多肽（Amino acids and peptides）
 - 8.5.1. 基于俗名的命名法（Nomenclature based on trivial names）
 - 8.5.1.1. α -氨基酸的构型
 - 8.5.1.2. α -氨基酸的官能团修饰衍生物的命名
 - 8.5.1.3. 其他保留使用的氨基酸俗名
 - 8.5.2. 氨基酸及其衍生物的取代操作法命名（Substitutive names of amino acids and derivatives）
 - 8.5.2.1. 碳原子上取代衍生物的命名
 - 8.5.2.2. 氨基酸作为取代基时的命名
 - 8.5.2.2.1. 由氨基酸碳原子衍生的取代基（Substituent groups with the free valence on a carbon atom）
 - 8.5.2.2.2. 由氨基酸氮原子衍生的取代基（Substituent groups with the free valence on a nitrogen atom）

- 8.5.2.2.3. 由氨基酸氧或硫原子衍生的取代基 (Substituent groups with the free valence on an oxygen or sulfur atom)
- 8.5.2.3. 氨基酸的酰胺、酰苯胺、酰肼以及类似衍生物的命名 (Amides, anilides, hydrazides and analogous derivatives)
- 8.5.2.4. 氨基酸的醇、醛、酮衍生物命名 (Alcohols, aldehydes, and ketones)
- 8.5.3. 肽的命名 (Nomenclature of peptides)
 - 8.5.3.1. 肽的名称 (Names of peptides)
 - 8.5.3.2. 肽的符号表示 (Symbols of peptides)
 - 8.5.3.3. 肽链中构型的表示 (Indication of configuration in peptides)
 - 8.5.3.4. 环肽 (Cyclic peptides)
 - 8.5.3.5. 前缀 ‘endo’ (The prefix ‘endo’)
 - 8.5.3.6. 前缀 ‘des’ (The prefix ‘des’)
- 8.6. 核苷和核苷酸 (Nucleosides and Nucleotides)
 - 8.6.1. 核苷
 - 8.6.1.1. 保留使用的核苷俗名见下，中文括号内的字一般省略。
 - 8.6.1.2. 核苷上的取代 (Substitution on nucleosides)
 - 8.6.1.2.1. 核苷中嘌呤和嘧啶环上取代衍生物
 - 8.6.1.2.2. 存在高于 (假 (pseudo)) 酮的特性基团
 - 8.6.2. 核苷酸 (Nucleotides)
 - 8.6.2.1. 俗名仍保留作为核苷磷酸酯的命名
 - 8.6.2.2. 核苷二磷酸酯与三磷酸酯 (Nucleotide diphosphates and triphosphates)
 - 8.6.2.3. 核苷酸的衍生物 (Derivatives of nucleotides)
 - 8.6.2.3.1. 具有俗名的核苷酸的衍生物
 - 8.6.2.3.2. 核苷二-和多磷酸酯的类似物
 - 8.6.2.3.3. 存在高于磷酸残基的特性基团
 - 8.6.2.3.4. 寡核苷酸
- 8.7. 类脂 (Lipids)
 - 8.7.1. 定义
 - 8.7.2. 甘油酯 (Glycerides)
 - 8.7.3. 磷脂 (Phospholipids)
 - 8.7.3.1. 磷脂酸 (Phosphatidic acids)
 - 8.7.3.1.1. 磷脂酸的通式
 - 8.7.3.1.2. 磷脂酸的构型 (Configuration of phosphatidic acids)
 - 8.7.3.2. 甘油磷脂 (phosphoglycerides)
 - 8.7.3.2.1. 磷脂酰丝氨酸 (Phosphatidylserines)
 - 8.7.3.2.2. 磷脂酰胆碱 (Phosphatidylcholines)
 - 8.7.3.2.3. 磷脂酰乙醇胺 (Phosphatidylethanolamine)
 - 8.7.3.2.4. 磷脂酰肌醇 (Phosphatidylinositols)
 - 8.7.4. 糖脂 (Glycolipids)
 - 8.7.4.1. 定义
 - 8.7.4.2. 甘油糖脂 (Glycoglycerolipids)

- 8.7.4.3. 鞘糖脂 (Glycosphingolipids)
 - 8.7.4.3.1 鞘糖脂的名称
 - 8.7.4.3.2. 神经酰胺 (Ceramides)
 - 8.7.4.3.3. 中性鞘糖脂 (Neutral glycosphingolipids)

第 9 章 同位素丰度改变化合物 (Isotopically Modified Compounds)

9.1 符号和定义

- 9.1.1. 核素符号
- 9.1.2. 原子符号
- 9.1.3. 天然同位素丰度化合物
- 9.1.4. 同位素丰度改变化合物

9.2 同位素取代的化合物

- 9.2.1. 分子式
- 9.2.2. 命名

9.3 同位素标记的化合物

- 9.3.1. 特定标记化合物
 - 9.3.1.1 特定标记的化合物的结构式的写法
 - 9.3.1.2. 特定标记的化合物命名
- 9.3.2. 选择性标记化合物
 - 9.3.2.1. 选择性标记化合物的结构式的写法
 - 9.3.2.2. 选择性标记化合物的命名
- 9.3.3. 非选择性标记化合物
 - 9.3.3.1. 非选择性标记分子式
 - 9.3.3.2. 非选择性标记化合物的命名
- 9.3.4. 贫同位素化合物
 - 9.3.4.1. 贫同位素的表示方法
 - 9.3.4.2. 贫同位素化合物的命名