有机化合物系统命名 CCS 2017 规则的基础教学研究

王丽娟*, 刘芸, 靳菊情, 李洋, 许昭, 唐玉海, 徐四龙

西安交通大学化学学院, 西安 710049

摘要: 为与国际命名更好地接轨,《有机化合物命名原则2017》对有机化合物的中文系统命名原则进行了修订与增补。为了帮助学习者更好地掌握新版命名原则,本文以基础有机化学中的各类化合物为目标,对修订后的相关系统命名原则进行了归纳和总结,并结合实例进行了新旧命名原则的对比。

关键词: 有机化合物; 系统命名; CCS 2017规则

中图分类号: G64; O6

Basic Teaching Research of CCS 2017 Rules for the Systematic Nomenclature of Organic Compounds

Lijuan Wang *, Yun Liu, Juqing Jin, Yang Li, Zhao Xu, Yuhai Tang, Silong Xu

School of Chemistry, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China.

Abstract: For better integration with the international nomenclature, the principles for naming organic compounds in Chinese have been revised and supplemented in the book *Principles for Naming Organic Compounds 2017*. To help readers effectively learn the new naming principles, this paper considers various compounds in basic organic chemistry and briefly summarizes the revised naming principles by comparing the old and new versions with a range of examples.

Key Words: Organic compounds; Systematic nomenclature; CCS 2017 rules

有机化合物命名方法是有机化学课程教学的主要内容之一。正确掌握各类有机化合物的系统名称,不仅有助于学习者更好地掌握有机化学相关知识,还有助于学习者更方便地查阅文献、资料,顺利与国内外同行进行学术交流。所以,正确掌握有机化合物系统命名方法对于化学及相关领域的工作者来说,是十分必要的。

有机化合物的系统中文名称是依据《有机化学命名原则》对有机化合物的命名。《有机化学命名原则》是由中国化学会(Chinese Chemical Society, CCS)依据国际纯粹与应用化学联合会(International Union of Pure and Applied Chemistry, IUPAC)命名原则,并结合中文特点和表达习惯而制定的。依据IUPAC原则命名的英文名称,称为有机化合物的IUPAC名称。最新版的《Nomenclature of Organic Chemistry》(IUPAC Recommendations and Preferred Names)蓝皮书于2013年12月出版^[1]。目前,国内大多数有机化学教材中化合物的命名均依据于中国化学会发布的《有机化学命名原则》(1980年)。但随着化学学科快速发展,CCS 1980版命名原则已不能很好地适应需求。为了便于理解与交流,中国化学会参考了IUPAC历年来推荐的命名原则文件,修订并出版了《有机化学命名原

收稿: 2021-09-24; 录用: 2021-11-22; 网络发表: 2021-12-15

*通讯作者, Email: w.z.r.2002@mail.xjtu.edu.cn

基金资助: 2021年西安交通大学教学研究改革项目(MK2021004)

则》(2017版)(即CCS 2017)^[2]。CCS 2017版与CCS 1980版相比较,命名原则有较大幅度的修订与增补,与IUPAC 2013命名原则更加接近。

CCS 2017版命名原则于2017年12月正式发布后,为适应新的命名原则,国内许多有机化学教材陆续进行了相关修订。2019年,我校也针对新版命名原则的发布,启动了《有机化学》教材修订项目。2020年,教材完成修订并正式出版。2021年春季,完成了第一轮教学实践。在教学实践中,课程组教师发现:由于现行高中教材有机化学内容仍采用的是CCS 1980版命名原则,导致大一学生受惯性思维影响比较严重。另外,很多教师因长期讲授并使用CCS 1980版命名原则,在讲授CCS 2017版命名原则的过程中,也非常容易出现混淆与错误。为了帮助大家尽快理解、掌握CCS 2017版命名原则,我们教学团队针对基础有机化学中常涉及的各类有机化合物的CCS 2017命名变化进行了归纳与总结,希望能为同行与学习者提供帮助与参考。

1 有机化合物系统命名的基本方法

有机化合物系统命名方法主要分为三步:第一,确定母体结构与名称;第二,对母体结构进行编号;第三,按照构型-取代基的位次号-取代基的名称-母体名称的顺序(若有异构存在,需标出构型),给出化合物的完整名称。这三个步骤对于不同类型的有机化合物命名是通用的,但在实际命名时,往往会碰到具体问题:怎么确定母体结构?如何对母体结构进行编号?编号的原则是什么?当结构中有两个以上不同取代基时,在给出名称时,先写出哪一个取代基?取代基的具体名称又如何确定?CCS 1980版命名原则与CCS 2017版命名原则都对这些问题进行了详细的说明,但具体原则有差异。本文以命名方法的三个步骤为线索来详细介绍两版命名原则的差异。

1.1 母体结构的确定

CCS 2017版命名原则中,与基础有机化学各类化合物母体结构确定的相关内容主要有五个变化:第一,“官能团”这一特定名称,更多地以“特性基团(characteristic group)”名称出现,但“官能团(functional group)”作为俗称,可继续使用;而用于区分化合物类别的特性基团称为主体基团。第二,主体基团确定的优先次序有所变化,将磺酸等含硫、磷的酸性基团置于羧酸基团与酸酐基团之间(具体见表1)。第三,对于无环化合物主链的选择需依据原则中的13条标准依次逐条对照,直至确定为止。结合有机化学教学实际情况,将规则可简化为:依次考虑最高位(优先)官能团、碳链长度、重键、取代基数、最低位次组等因素,以便于学生掌握^[3]。例如:当开链化合物结构中同时存在重键和非重键的其他主体基团时,CCS 2017命名原则建议母体选择应优先考虑主体基团尽可能多的最长链,而不是重键最多的链;当有多条最长的链可选时,再依次考虑含重键数目多、取代基数目多的链^[4]。这里值得注意的是:CCS 2017命名原则中的按英文字母排列在前的前缀取代基的链为主链的第13条标准是CCS 1980版命名原则中没有出现的。另外,根据教学体会,在使用Chemdraw软件对于不饱和链烃进行命名时,中、英文名称不能直译采用。因为CCS 1980版与CCS 2017版命名原则中关于不饱和链烃的母体选择标准都是优先选择含有最多个数的重键且又尽可能最长的链为母体,而IUPAC 2013原则建议在链状烃时,主链的选择取决于链长,而不是不饱和度,即链长为第一优先原则^[5]。第四,CCS 2017版命名原则对环状烃类化合物的命名不仅有修订,还增补了“慢”与“蕃”两种新名称。CCS 2017命名原则中,慢环是指含最大非累积双键数的不饱和环系化合物,如环庚三烯称为环庚慢,[12]轮烯称为环十二碳慢,1,3-噁唑称为1,3-氧氮杂环戊慢。慢环名称适用于环状多烯、轮烯,以及含有重键的杂环化合物。因慢环命名简捷,CCS 2017命名原则建议含有重键的杂环化合物名称优先选用慢环作为后缀^[6]。但是,在这需说明的是,噻唑、噁唑等杂环化合物的音译名称仍可继续使用。蕃是指多个环或环系通过原子链连接成链或环的化合物,其中成环者即为环蕃。因蕃类化合物在基础有机化学中涉及较少,故不做进一步讨论。此外,当化合物结构中既有环又有链时,CCS 2017命名原则建议母体选择以带有主特性基团的环或链作为母体氢化物为第一优先原则,且不论环的大小和链的长短^[7];而IUPAC 2013命名原则建议:命名分子中既有环又有链

的化合物时，不考虑所含原子数多少，环总是优先于链。CCS 2017版命名原则建议暂不采用该建议^[5]。第五，偶氮类化合物结构上可视为乙氮烯类相关的衍生物，母体结构HN=NH命名为乙氮烯。

表1 特性基团类型的优先次序^[5]

按特性基团分类的化合物类型
自由基>负离子>正离子>两性离子化合物>羧酸>过氧酸>磺酸>亚磺酸>硒酸>膦酸>肟酸>酸酐>酯>酰卤>酰胺>酰肼>二酰亚胺>腈>醛>酮>酚>醇>氢过氧化物>胺>亚胺>肟>醚>过氧化物

1.2 母体结构编号顺序的确定

要准确给出有机化合物的名称，还需给母体碳原子进行编号，以标出取代基和主体基团的位次号。编号时，新旧两版命名原则都是优先考虑主体基团，使其位次号要尽可能小。2017版命名原则中，将原有的“最低系列”改为“最低(小)位次组”原则，是指在母体编号时，将按照“额外氢、后缀的主体基团、杂原子、不饱和键、取代基”的顺序依次考虑使其有尽量小的位次^[2]。

1.2.1 数字位次组

数字位次组是按数字由小及大进行排列，不同组相比较时，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^[5]。具体编号方法，可参考本文第2节中的各类化合物命名举例中的解释说明。

1.2.2 常见取代基的名称与结构

取代母体结构或特性基团中氢原子的原子或基团，被称为“基”或“亚基”。“基”的定义没有发生变化；而“亚基”名称在两版命名中，有差异。

CCS 1980版的命名规则中，通过两单键或一双键与分子其余部分相连的结构单元，被称为“亚基”。而在CCS 2017版中，“亚基”虽作为通称被保留下来，但又被细化为“叉基”和“亚基”两种后缀。当取代基以两个单键连接分子骨架的同一个原子时，被称为“亚基”；而取代基以两个单键分别连接分子骨架的两个原子时，则被称为“叉基”^[5]。

书写有机化合物名称时，需先列出取代基的位次号及相应名称。CCS 2017版命名原则建议，取代基列出的先后顺序依据取代基的英文名称的首字母顺序。另外，对母体进行编号时，可能会出现两种不同取代基的位次号相同，原则建议具体编号顺序由取代基的英文名称首字母顺序来确定。所以，识别常见取代基的结构，掌握其相应的中英文名称是正确写出有机化合物CCS 2017系统名称的基础。为方便大家参考，表2列出了常见烃基取代基的结构式与中英文名称；表3列出了常见其他取代基的结构式与中英文名称。

表2 常见烃基取代基的结构式与中英文名称

结构式	中文名称	英文名称	结构式	中文名称	英文名称
CH_3-	甲基	methyl (Me)	$\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-$	乙烯基	ethenyl (vinyl)
CH_3CH_2-	乙基	ethyl (Et)	$\text{CH}_3\text{CH}=\text{CH}-$	丙-1-烯基， 丙烯基	prop-1-enyl
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2-$	正丙基	propyl (Pr, <i>n</i> -Pr)	$\text{CH}_2=\text{CHCH}_2-$	丙-2-烯基， 烯丙基	prop-2-enyl (allyl)
$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C} \\ \\ \text{H}_3\text{CCH}- \end{array}$	1-甲基乙基， 异丙基	isopropyl (<i>i</i> -Pr)	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_2=\text{C}- \end{array}$	丙-1-烯-2-基， 异丙烯基	prop-1-en-2-yl
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$	正丁基	butyl (Bu, <i>n</i> -Bu)	$\text{HC}\equiv\text{C}-$	乙炔基	ethynyl

(待续)

(续表2)

结构式	中文名称	英文名称	结构式	中文名称	英文名称
$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C} \\ \\ \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}- \end{array}$	1-甲基丙基, 仲丁基	sec-butyl (s-Bu)	$\text{H}_3\text{CC}\equiv\text{C}-$	丙-1-炔基, 丙炔基	prop-1-ynyl
$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C} \\ \\ \text{CH}_3\text{CHCH}_2- \end{array}$	2-甲基丙基, 异丁基	isobutyl (i-Bu)	$\text{HC}\equiv\text{CCH}_2-$	丙-2-炔基, 炔丙基	prop-2-ynyl (propargyl)
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{H}_3\text{CC}- \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	1,1-二甲基乙基, 叔丁基	tert-butyl (t-Bu)		环己基	cyclohexyl
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{CH}_2- \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	2,2-二甲基丙基, 新戊基	neopentyl		苯基	phenyl (Ph)
苯甲基, 苄基	benzyl (Bn)		邻甲苯基	o-methylphenyl (o-tolyl)
对甲苯基	p-methylphenyl (p-tolyl)		间甲苯基	m-methylphenyl (m-tolyl)
萘-1-基 (CCS1980: 1-萘基)	naphthalen-1-yl (1-naphthyl)		萘-2-基 (CCS 1980: 2-萘基)	naphthalen-2-yl (2-naphthyl)
$\text{H}_2\text{C}=\text{}$	甲亚基 (CCS1980: 亚甲基)	methylidene (methylene)	$\text{CH}_3\text{CH}=\text{}$	乙亚基 (CCS 1980: 亚乙基)	ethylidene
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}=\text{}$	丙-1-亚基	propan-1-idene	$(\text{CH}_3)_2\text{C}=\text{}$	丙-2-亚基, 异丙亚基 (CCS 1980: 亚异丙基)	propan-2-idene
$-\text{CH}_2-$	甲叉基	methanediyl	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$	乙-1,2-叉基	ethane-1,2-diyl
$\begin{array}{c} \\ \text{CH}_3\text{CH}- \end{array}$	乙-1,1-叉基	ethane-1,1-diyl	$(\text{CH}_3)_2\text{C} \diagup \diagdown$	丙-2,2-叉基	Prop-2,2-diyl

表3 常见其他取代基的结构式与中英文名称

结构式	中文名称	英文名称	结构式	中文名称	英文名称
ClCH_2-	氯甲基	chloromethyl	$\text{HO}-$	羟基	hydroxy
$\text{F}-$	氟	fluoro	HOCH_2-	羟甲基	hydroxymethyl
$\text{Cl}-$	氯	chloro	$\text{RO}-$	烷氧基	alkoxy
$\text{Br}-$	溴	bromo	$\text{O}_2\text{N}-$	硝基	nitro
$\text{I}-$	碘	iodo	$\text{ON}-$	亚硝基	nitroso
$\text{H}_2\text{N}-$	氨基	amino	$\text{NC}-$	氰基	cyano
$\text{CH}_3\text{NH}-$	甲氨基	methylamino	$\text{HS}-$	巯基	sulfanyl
$(\text{CH}_3)_2\text{N}-$	二甲氨基	dimethylamino	$\text{CH}_3\text{S}-$	甲硫基	methylsulfanyl (methylthio)
$\text{HN}=\text{}$	氮亚基 (CCS 1980: 亚氨基)	imino	$\text{S}=\text{}$	硫亚基 (CCS 1980: 硫代)	sulfanylidene (thioxo)
$\text{O}=\text{}$	氧亚基 (CCS 1980: 氧代)	oxo	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{H}-\text{C}- \end{array}$	甲酰基	methanoyl (formyl)

(待续)

(续表3)

结构式	中文名称	英文名称	结构式	中文名称	英文名称
	乙酰基	ethanoyl (acetyl, Ac)		氯羰基	chlorocarbonyl
	苯甲酰基	benzoyl		氨基羰基	aminocarbonyl (carbamoyl)
	环己烷羰基	cyclohexanecarbonyl		乙酰氧基	acetoxy
	羧基	carboxy		乙酰氨基	acetamido
	羧甲基	carboxymethyl		磺酸基	sulfo

注意：表2中的烯丙基英文名称是prop-2-enyl，但在实际命名时，常用其英文俗名allyl。在采用CCS 2017命名原则时，烯丙基因其英文首字母为a而往往先列出。除此之外，甲亚基、乙烯基、苯甲基、甲酰基、乙酰基等其他取代基也存在这种情况。所以，这些取代基的英文俗名也需掌握。此外，当化合物结构中出现两个或两个以上相同取代基时，相应英文名称中出现描述取代基个数的词头“di、tri、tetra”等，不参与取代基的字母排序。不参与字母排序的词头还有“sec、tert”，但是“iso”和“neo”词头参与字母排序。

需要说明的是，若化合物结构中的支链较复杂，CCS 2017版命名原则建议，复杂取代基的名称放在括号内，而且其可能出现的描述个数的词头需要参与字母排序。而CCS 1980版命名原则规定复杂取代基全名可放在括号中，也可将取代基名称中的编号数字加撇而不用括号。CCS 2017版命名原则不建议继续采用后一种加撇格式。

1.2.3 立体异构的表示方法

有机化合物结构中通常存在立体异构的现象。所以，要准确给出有机化合物的完整名称，还需标出化合物可能存在的顺反异构或手性异构类型。CCS 2017版与CCS 1980版的命名原则相比，顺反异构标记的主要变化为：

1) 当结构中存在顺反异构时，可用“Z/E”，也可用“cis/trans”标记，但不再用汉字“顺/反”标记。

2) 若烯烃为三或四取代双键化合物时，应选用“Z/E”标记，若继续使用“cis/trans”标记可能会造成混乱。

3) 若环上有多个取代基，且存在顺反异构现象时，需以顺序规则(Cahn-Ingold-Prelog规则，CIP优先系统)中位次较低的基团(在该基团前，加*r*前缀标记，*reference substituent*)为参照，再用“*c* (cis)”或“*t* (trans)”标出其他基团的相对位置。IUPAC 2013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。

手性异构的标记方法仍然采用“D/L”和“R/S”两种方法。CCS 2017版与CCS 1980版的命名原则中对于“D/L”和“R/S”具体标记规则与方法没有变化。

1.3 化合物名称的书写

CCS 1980版和CCS 2017版有机化合物命名原则对化合物系统名称的书写格式要求有明显差异。为帮助大家更清晰地了解，现将有机化合物CCS 1980版和CCS 2017版的命名格式列出，以方便参考。

CCS 1980版有机化合物系统名称一般书写格式：

构型类型(若有异构)-取代基位次号-取代基名称(多个取代基按次序规则列出，较优基团后出现)-主官能团位次号-母体名称。

CCS 2017版有机化合物系统名称一般书写格式:

构型类型(若有异构)-取代基位次号-取代基名称(多个取代基按英文名称首字母的先后顺序列出)-母体碳原子数目(天干或中文数字)-主体基团位次号-主体基团名称。

相比CCS 1980版命名原则对书写格式的要求, CCS 2017版命名原则与之最大的区别是: 化合物中的原子和基团的位次数字一律放在它们各自名称之前。另外, CCS 2017版命名原则对书写化合物名称时的标点符号与字母格式都给出了详细的规定。建议括号、逗号、原点等标点符号采用中文半字符(英文标点符号)。标记相对构型的字母D/L以及标记取代基与主体基团相对位置的字母 α 、 β 、 γ 等字母采用正体格式, 而其他常见字母通常采用斜体格式, 如: *n*-(正), *iso*-(异), *sec*-(仲), *tert*-(叔), *O*-(基团连接在氧原子上), *N*-(基团连接在氮原子上), *P*-(基团连接在磷原子上), *S*-(基团连接在硫原子上), *H*-(该位置上为氢或加氢), *Z*(顺式构型), *E*(反式构型), *cis*(顺式构型), *trans*(反式构型), *R*(一种绝对手性构型), *S*(另一种绝对手性构型), *o*-(苯环上的二元取代基呈邻位, *ortho*), *m*-(苯环上的二元取代基呈间位, *meta*), *p*-(苯环上的二元取代基呈对位, *para*)等^[5]。

2 化合物命名举例

为帮助大家进一步理解CCS 1980版与CCS 2017版有机化合物命名原则的差异, 本文通过举例来说明, 具体如下:

IUPAC 2013: 3-ethyl-4-methylhexane

CCS 2017: 3-乙基-4-甲基己烷

CCS 1980: 3-甲基-4-乙基己烷

注释: 选择含六个碳原子的最长碳链为母体。CCS 1980 版命名原则要求, 编号要使较优基团(CIP 规则)后出现, 所以, CCS 1980 版的命名中, 甲基位次号为 3, 乙基位次号为 4。而 CCS 2017 版要求, 编号要优先使取代基英文首字母靠前的基团位次号较小, 甲基的英文名称为 methyl, 乙基 ethyl, 所以, 乙基的位次号为 3, 甲基的位次号为 4, 化合物 CCS 2017 版的系统名称为: 3-乙基-4-甲基己烷。

IUPAC 2013: 3-ethyl-2,5-dimethylhexane

CCS 2017: 3-乙基-2,5-二甲基己烷

CCS 1980: 2,5-二甲基-3-乙基己烷

注释: 选择含六个碳原子的最长碳链为母体。按照最低位次组的原则进行编号; 从左到右, 取代基位次号是: 2,3,5; 而从右到左, 取代基位次号是: 2,4,5。所以, 取代基位次号是 2,3,5。CCS 1980 版命名原则建议: 书写名称时, 较优基团(按照顺序规则比较)后出现; 相同基团合并。而 CCS 2017 版命名原则建议: 书写名称时, 取代基列出的顺序需按照其英文首字母顺序列出。乙基的“e”优于甲基“m”, 所以, 化合物 CCS 2017 版的系统名称为: 3-乙基-2,5-二甲基己烷。

IUPAC 2013: 5-ethyl-3,7-dimethylundecane

CCS 2017: 5-乙基-3,7-二甲基十一烷

CCS 1980: 3,7-二甲基-5-乙基十一烷

注释: 选择 11 个碳原子连接的最长碳链为母体。取代基的位次号应遵循最小位次号的原则, 从左到右编号为: 3,5,7。但是, CCS 2017 版名称中, 取代基列出的顺序需按照其英文首字母顺序列出; 表示相同基团数目的前缀“di”“tri”“tetra”等不参与字母排序。所以, 乙基的“e”优于甲基“m”, 化合物 CCS 2017 版的系统名称为: 5-乙基-3,7-二甲基十一烷。注意: 前缀“sec”“tert”也不参与字母排序。

IUPAC 2013: 5-(1,2-difluoropropyl)-3,8-diethyldecane

CCS 2017: 5-(1,2-二氟丙基)-3,8-二乙基癸烷

CCS 1980: 3,8-二乙基-5-1',2'-二氟丙基癸烷

注释: 按照 CCS 1980 和 CCS 2017 版命名原则, 母体选择和编号顺序是一样的。母体都为连有 10 个碳原子的长链。编号的顺序都是从左到右。但书写的格式有差异。CCS 1980 要求把较复杂取代基的名称放在括号内或位次号的数字加撇区别。而 CCS 2017 只要求把复杂取代基的名称放在括号内, 而不采用加撇格式。另外, CCS 2017 原则要求, 复杂取代基中的描述氟原子个数 di 的 d 参与字母排序, 因“d”优于“e”所以, 化合物 CCS 2017 系统名称为: 5-(1,2-二氟丙基)-3,8-二乙基癸烷。

IUPAC 2013: 4-vinylnonane

CCS 2017: 3-丙基辛烯

CCS 1980: 3-丙基辛烯

IUPAC 2013: *cis*-pent-2-ene or (Z)-pent-2-eneCCS 2017: *cis*-戊-2-烯或(Z)-戊-2-烯

CCS 1980: 顺-2-戊烯或(Z)-2-戊烯

IUPAC 2013: cyclonona-1,3,5,7-tetraene

CCS 2017: 1H-环壬烯或 1H-[9]轮烯或环壬-1,3,5,7-四烯

CCS 1980: 1H-[9]轮烯或环壬-1,3,5,7-四烯

IUPAC 2013: 5-methyleneheptan-2-ol

CCS 2017: 5-甲亚基庚-2-醇

CCS 1980: 5-乙基-5-己烯-2-醇

IUPAC 2013: 1-(4-hydroxycyclohexyl)-2-methylhexane-1,6-diol

CCS 2017: 1-(4-羟基环己基)-2-甲基己-1,6-二醇

CCS 1980: 2-甲基-1-(4-羟基环己基)-1,6-己二醇

IUPAC 2013: (cyclopentyl)oxybenzene

CCS 2017: 环戊基苯基醚或环戊氧基苯

CCS 1980: 苯基环戊基醚

注释: CCS 1980 版和 CCS 2017 版命名原则建议不饱和链烃的母体选择要优先考虑双键所在的最长碳链。所以,母体为包含双键的含有 8 个碳原子的长链,编号要优先使双键位次号较低,所以,化合物的 CCS 1980 版和 CCS 2017 版系统名称为: 3-丙基辛烯。但是, IUPAC 2013 原则建议以链长为第一优先原则,所以,按照该原则,母体为含有 9 个碳的最长碳链,而含有双键的乙烯基则作为取代基。

注释: 按照 CCS 1980 命名原则,双键碳上连有不同基团,相同基团在双键的同侧,为顺式;另外,两个较优基团在同侧,也可称为 Z 式。所以,该结构命名为顺-2-戊烯或(Z)-2-戊烯。而 CCS 2017 命名原则建议,若化合物结构中有顺反异构时,用 *cis/trans* 或 *Z/E* 标识顺反异构。所以,化合物的 CCS 2017 系统名称为: *cis*-戊-2-烯或(Z)-戊-2-烯。

注释: 含碳原子数大于 6 的最大非累积双键数的单环不饱和烃,可以[n]轮烯命名;当 n 为奇数的轮烯,可用氢的标注法在词前标注。另外, CCS 2017 命名原则还建议可采用后缀为烯的命名法,格式为: 环+基(碳原子数目的天干或)+烯。若母环(是指含最大非累积双键数的饱和环系化合物)结构中有额外氢,则置于其前。所以,化合物名称为: 1H-环壬烯或 1H-[9]轮烯或环壬-1,3,5,7-四烯。

注释: 该化合物含有双键与羟基,而羟基为主体基团。按照 CCS 1980 命名原则,母体为羟基碳,并包含双键在内的碳链,编号是从左到右的顺序,所以,取代基为乙基,位次号是 5,化合物的 CCS 1980 版系统名称为: 5-乙基-5-己烯-2-醇。而按照 CCS 2017 版命名原则,母体为羟基碳所在的最长碳链,编号的顺序是从左到右。所以,取代基为甲亚基,位次号为 5。所以,化合物 CCS 2017 系统名称为: 5-甲亚基庚-2-醇(注意: CCS 2017 版命名原则要求特性基团的位次号放在特性基团名称之前)。

注释: 当化合物中既有环又有链时,选择带有优先特性基团的环或链作为母体氢化物,而不考虑环的大小和链的长短。而若当结构中有多个优先特性基团时,选择连接特性基团多的环或链为母体氢化物。依据这个原则,因该化合物的链上有两个羟基。所以,选择两个羟基碳所在的最长碳链为母体。编号按照最低位次组的原则。所以,化合物 CCS 2017 系统名称为: 1-(4-羟基环己基)-2-甲基己-1,6-二醇。注意: IUPAC 2013 建议选择母体时,环优先于链。这一建议, CCS 2017 命名原则没有采用。

注释: CCS 1980 版命名原则建议,混合芳香醚的命名采取芳香基团名称在前,脂肪烃基名称在后的原则,最后以“醚”字结尾。所以,化合物的 CCS 1980 系统名称为: 苯基环戊基醚。而 CCS 2017 版命名原则建议,混合醚的命名,将不同取代基的名称按照英文首字母顺序列出,再加上后缀“醚”字。所以,化合物的 CCS 2017 系统名称为: 环戊基苯基醚。另外,也可选择苯为母体结构,将碳数较少的烃氧基作为取代基。所以,化合物的名称也可为: 环戊氧基苯。化合物的 CCS 2017 系统名称为: 环戊基苯基醚或环戊氧基苯。

IUPAC 2013: 1-bromo-3-isopropyl-5-methoxycyclohexane

CCS 2017: 1-溴-3-异丙基-5-甲氧基环己烷

CCS 1980: 1-异丙基-3-甲氧基-5-溴环己烷

IUPAC 2013: 2-methyl-4-oxohexanal

CCS 2017: 2-甲基-4-氧亚基己-1-醛

CCS 1980: 2-甲基-4-氧代己醛

IUPAC 2013: pentane-1,2,5-tricarboxylic acid

CCS 2017: 戊(烷)-1,3,5-三甲酸

CCS 1980: 4-羧基庚二酸

IUPAC 2013: 3-chloro-3-oxopropanoic acid

CCS 2017: 氯羰基乙酸

CCS 1980: 氯酰基乙酸

IUPAC 2013: dihydrofuran-2,5-dione

CCS 2017: 四氢呋喃-2,5-二酮或丁二酸酐

CCS 1980: 丁二酸酐

IUPAC 2013: dihydrofuran-2(3H)-one

CCS 2017: 四氢呋喃-2-酮或丁-4-内酯或γ-丁内酯

CCS 1980: γ-丁内酯

注释: 选择六元环为母体结构, CCS 1980 版命名原则建议编号优先尽量使较优基团后出现, 所以, 化合物的 CCS 1980 系统名为: 1-异丙基-3-甲氧基-5-溴环己烷。而 CCS 2017 版命名原则编号按照最小位次组原则的同时, 优先使英文首字母靠前的基团位次号尽可能小。因甲氧基的首字母为 m, 溴的首字母为 b, 异丙基的首字母为 i。所以, 化合物的 CCS 2017 系统名称为: 1-溴-3-异丙基-5-甲氧基环己烷。注意: “iso” 词头参与字母排序。

注释: 按照 CCS 1980 和 CCS 2017 版命名原则, 母体选择和编号顺序是一样的。醛基为主体基团, 母体为醛基碳所在的最长碳链, 编号从醛基碳开始。所以, 甲基的位次号为 2, 酮羰基的位次号为 4。CCS 1980 版命名原则, 用氧代表示酮羰基, 而 CCS 2017 命名原则中, 酮羰基称为氧亚基。所以, 化合物 CCS 2017 版的系统名称为: 2-甲基-4-氧亚基己-1-醛。

注释: CCS 1980 版命名原则, 母体为两个羧基碳所在的最长碳链, 编号优先考虑羧基碳的位次号尽可能小的原则。所以, 化合物的 CCS 1980 版系统名为: 4-羧基庚二酸。而 CCS 2017 版命名原则建议, 若直链烃直接与两个以上羧基相连, 可看作母体氢化物为羧基所取代, 加“某甲酸(某, 甲酸的数目)”后缀。该化合物结构中出现三个羧基, 选择主体基团最多的碳链戊烷为母体氢化物, 所以, 化合物 CCS 2017 版的系统名称为: 戊(烷)-1,3,5-三甲酸(“烷”字可省略)。

注释: 按照 CCS 1980 和 CCS 2017 版命名原则, 母体选择和编号顺序是一样的。母体为羧基碳所在的最长碳链。编号从羧基碳开始。酰氯基团作为取代基时, CCS 1980 版与 CCS 2017 版的名称不同。CCS 1980 版, 称之为: 氯酰基, 而酰氯 CCS 2017 版命名原则建议: 当有优先作为主体的其他基团存在时或酰氯基团连接在取代基上时, 酰氯基以“氟羰基、氯羰基、溴羰基、碘羰基”等名称作为前缀出现。所以, 化合物 CCS 2017 版的系统名称为: 氯羰基乙酸。

注释: 按照 CCS 1980 和 CCS 2017 版命名原则, 母体选择和编号顺序是一样的。CCS 1980 版命名原则建议, 二元羧酸形成的酸酐, 在其相应酸的名称之后加后缀“酐”字。而 CCS 2017 版命名原则建议, 由同一个母体氢化物上两个羧基脱水形成的环状酸酐可按对称酸酐命名, 也可按照杂环化合物命名。所以, 化合物 CCS 2017 版的系统名称为: 四氢呋喃-2,5-二酮或丁二酸酐。

注释: 羧基酸分子内形成的酯称为内酯。内酯的命名: 按杂环来命名, 也可将相应羧基酸的后缀更换为“内酯”, 并在此前插入形成内酯的酸和羟基的位次来命名。按照杂环命名, 四氢呋喃环为母体结构, 氧原子的位次号为 1。所以, 化合物的命名为: 四氢呋喃-2-酮。该化合物也可采用后缀“内酯”命名。因形成该内酯的羧基酸为 γ-羟基丁酸或 4-羟基丁酸, 所以, 化合物 CCS 2017 系统名称为: 丁-4-内酯或 γ-丁内酯。

IUPAC 2013: 3-bromo-*N*-ethyl-*N*-methylhexanamideCCS 2017: *N*-乙基-*N*-甲基-3-溴己酰胺CCS 1980: *N*-甲基-*N*-乙基-3-溴己酰胺

注释：单酰胺化合物的命名，将原羧酸名称中的后缀“酸”更换为“酰胺”。若酰胺中氮上的氢被其他基团取代，命名时，将取代基名称放在“*N*-”之后，作为取代基列在母体名称之前。CCS 1980 版命名原则建议，N 原子连接的取代基放置的位置取决于基团的优先次序，而 CCS 2017 版命名原则建议，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；不同取代基则按照英文首字母顺序排列。所以，化合物 CCS 2017 版的系统名称为：*N*-乙基-*N*-甲基-3-溴己酰胺。

IUPAC 2013: *N*',2-dimethyloctane-1,7-diamineCCS 2017: *N*',2-二甲基辛-1,7-二胺CCS 1980: *N*,2-二甲基-1,7-辛二胺

注释：选择氨基连接的碳所在的最长碳链为母体结构，编号尽可能使氨基位次号较低。CCS 2017 命名原则建议，对于含有两个、三个或更多胺结构单元化合物的命名，可采用 *N* 等作为前缀来标明不同氮上的取代基。IUPAC 2013 建议以该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。所以，化合物 CCS 2017 系统名称为：*N*',2-二甲基辛-1,7-二胺。而 CCS 1980 版命名原则没有建议使用上标。

IUPAC 2013: *N*-ethyl-*N*-methylcyclohexanamine

CCS 2017: 环己基(乙基)甲基氮烷

或 *N*-乙基-*N*-甲基环己(烷)胺

或环己基(乙基)甲基胺

CCS 1980: *N*-甲基-*N*-乙基环己基胺

注释：对于不对称的叔胺，可作为母体氢化物氮烷的取代衍生物命名；也可作为伯胺或仲胺的 *N*-取代衍生物；也可将所有取代基的名称加以相应的数字后缀后紧接着加上类别“胺”字，不同取代基按字母顺序排列，并用括号分开。所以，化合物的名称为：环己基(乙基)甲基氮烷或 *N*-乙基-*N*-甲基环己(烷)胺或环己基(乙基)甲基胺。

IUPAC 2013: 1-chloro-3-methyl-5-nitrobenzene

CCS 2017: 1-氯-3-甲基-5-硝基苯

CCS 1980: 1-甲基-3-硝基-5-氯苯

注释：选择苯环为母体结构，CCS 1980 版命名原则建议编号优先尽量使较优基团后出现，所以，化合物的 CCS 1980 系统名为：1-甲基-3-硝基-5-氯苯。而 CCS 2017 版命名原则建议，编号按照最小位次组原则的同时，优先使英文首字母靠前的基团位次号尽可能小。氯的英文首字母为 c，甲基的英文首字母为 m，硝基的英文首字母为 n，所以，化合物的 CCS 2017 系统名称为：1-氯-3-甲基-5-硝基苯。

IUPAC 2013: 1-bromo-4-methylnaphthalene

CCS 2017: 1-溴-4-甲基萘

CCS 1980: 1-甲基-4-溴萘

注释：选择萘环为母体结构，CCS 1980 版命名原则建议萘环的编号从 α 位开始。该化合物有四个 α 位，都可以编号为 1，但其中两个连有甲基或溴原子，按照顺序规则，溴原子优于甲基。所以，化合物的 CCS 1980 系统名为：1-甲基-4-溴萘。而 CCS 2017 版命名原则建议，编号时，要优先使英文首字母靠前的基团位次号尽可能小。溴的英文首字母为 b，甲基的英文首字母为 m。所以，化合物的 CCS 2017 系统名称为：1-溴-4-甲基萘。

IUPAC 2013: 1-chloro-5-nitronaphthalene

CCS 2017: 1-氯-5-硝基萘

CCS 1980: 1-硝基-5-氯萘

注释：选择萘环为母体结构，CCS 1980 版命名原则建议萘环的编号从 α 位开始。该化合物两个环的 α 位，都可以编号为 1，但其连接的基团不同，分别是氯原子和硝基，按照顺序规则，氯原子优于硝基。所以，化合物的 CCS 1980 系统名为：1-硝基-5-氯萘。而 CCS 2017 版命名原则建议，编号时，要优先使英文首字母靠前的基团位次号尽可能小。硝基的英文首字母为 n，氯的英文首字母为 c。编号时，要使氯原子的位次号较低，所以，化合物的 CCS 2017 系统名称为：1-氯-5-硝基萘。

IUPAC 2013: thiazole

CCS 2017: 1,3-硫氮杂环戊烯或 1,3-噻唑或噻唑

CCS 1980: 1,3-噻唑或噻唑

IUPAC 2013: 1-(4-bromophenyl)-2-(3-methylphenyl)diazene

CCS 2017: 1-(4-溴苯基)-2-(3-甲基苯基)乙氮烯

(俗名:3-甲基-4'-溴偶氮苯)

CCS 1980: 3-甲基-4'-溴偶氮苯

注释: 按照 CCS 2017 命名原则建议采用慢为后缀命名方法, 该化合物的中文后缀为环戊烯。环中的杂原子用杂原子元素名称加“杂”字。杂原子位置编号按照 O, S, N, NH 优先顺序编号。另外, 化合物有固定的英译名称仍可继续使用。所以, 化合物 CCS 2017 系统名称为: 化合物 CCS 2017 系统名称为: 1,3-硫氮杂环戊烯或 1,3-噻唑。

注释: 偶氮类化合物结构上可视为乙氮烯类相关的衍生物, 母体结构 $\text{HN}=\text{NH}$ 命名为乙氮烯; 两侧取代基可以相同或不同, 按照其英文首字母顺序列出。所以, 化合物 CCS 2017 系统名称为: 1-(4-溴苯基)-2-(3-甲基苯基)乙氮烯(俗名:3-甲基-4'-溴偶氮苯)。

IUPAC 2013: 1-(3-chlorophenyl)-2-(4-

chlorophenyl)diazene

CCS 2017: 1-(3-氯苯基)-2-(4-氯苯基)乙氮烯

CCS 1980: 3,4'-二氯偶氮苯

注释: CCS 1980 命名原则, 该结构命名为偶氮苯的衍生物。所以, 化合物的 CCS 1980 系统名为: 3,4'-二氯偶氮苯。而 CCS 2017 命名原则建议, 若此类结构上的芳环连接的基团只是卤素、硝基等取代基, 没有其他特定基团, 母体结构则为乙氮烯; 当 2 个取代基名称相同, 但其中数字位次不同, 则按此数字小大后排列。所以, 化合物的 CCS 2017 系统名称为: 1-(3-氯苯基)-2-(4-氯苯基)乙氮烯。

3 结语

本文对修订后的涉及基础有机化学的各类有机化合物的系统命名原则进行了归纳和总结, 并结合实例进行了新旧命名原则的对比。通过以上不同类型化合物命名的举例, 可以看到化合物新旧两版命名原则的差异。本文虽然列举了基础有机化学教材中常见的各类化合物命名, 但不完全, 如复杂并环类化合物等的命名变化未列出。要想全面理解、掌握 CCS 2017 新版命名规则, 还需学习者不断总结, 多加练习, 以熟练掌握 CCS 2017 新版命名原则, 适应学科发展的要求。

参 考 文 献

- [1] 刘强, 史玲, 刘志刚, 蔡双莲. 大学化学, **2018**, 33 (5), 44.
- [2] 赵淑杰, 李明堂, 朱鹤, 洪波, 刘文丛. 大学化学, **2019**, 34 (6), 66.
- [3] 黄跟平, 赵温涛. 化学教育(中英文), **2020**, 41 (24), 20.
- [4] 马宁, 王光伟, 张文勤. 大学化学, **2019**, 34 (9), 116.
- [5] 中国化学会. 有机化学命名原则. 北京: 科学出版社, 2017.
- [6] 罗千福, 王朝霞. 高等理科教育, **2020**, No. 2, 101.
- [7] 沈越, 李小瑞. 大学化学, **2020**, 35 (7), 130.