

医用有机化学教学中的化合物命名问题

林 琦 姚莉韵 杨若林*

(上海交通大学基础医学院, 上海 200025)

摘要: 总结了4种教学中遇到的有机化合物新、旧IUPAC名及CCS名差异情况, 并提出了解决办法。

关键词: 有机化合物; IUPAC命名; CCS命名

中图分类号: G64; O6

Some Nomenclature Problems in Teaching of Medicinal Organic Chemistry

LIN Qi YAO Li-Yun YANG Ruo-Lin*

(Basic Medicine Faculty, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200025, P. R. China)

Abstract: This paper summarizes the four kinds of differences appeared between the new and old IUPAC name and CCS name, and puts forward the solution.

Key Words: Organic compounds; IUPAC nomenclature; CCS nomenclature

有机化学是我国医学院校学生大学一年级的必修基础课。该课程的设置一方面是为后续学习生物化学、药理学等课程奠定基础, 另一方面也有助于学生后期解决化学损伤、有机物中毒等临床问题。在有机化学教学中化合物的命名是基础知识点, 也是容易出现混淆的部分。在教学中使用的名称包括IUPAC名、CCS名(系统名)、俗名和商品名, 实际应用中还有CA名等。如2-acetoxybenzoic acid是IUPAC名, 2-乙酰氧基苯甲酸是CCS名, 乙酰水杨酸是俗名, 阿司匹林是商品名。俗名和商品名是个别化合物在实际应用中的名称, 与化合物有对应关系, 不易搞错。IUPAC名是按照国际纯粹与应用化学联合会(International Union of Pure and Applied Chemistry)发布的命名规则给予化合物的名称(英文)。最新版《有机化学命名法》(《Nomenclature of Organic Chemistry》, IUPAC Recommendations and Preferred Names)蓝皮书于2013年12月出版。CCS名是依据中国化学会制定的《有机化学命名原则》给予化合物的名称(中文), 也称为系统名。目前广泛使用的《有机化学命名原则》出版于1983年, 其命名原则的制定参考了1979年IUPAC发布的《有机化学命名法》蓝皮书。虽然2010年化学名词审定委员会在国家自然科学基金的资助下制定了《有机化学命名原则》2010年推荐版, 但这一版本的第5稿仍处于网站公告和意见修订状态^[1]。

由于IUPAC命名规则几经修改, 而《有机化学命名原则》(中文)的修订速度远落后于IUPAC更新《有机化学命名法》的速度, 因此导致不同教材、参考书、文献及软件命名系统对同一化合物给予名称的差异, 有时容易引起混乱。如《基础有机化学》(邢其毅, 第3版)中化合物的IUPAC名为旧版, 2014年出版的《Organic Chemistry》(P. Y. Bruice, 7th Edition)和2015年出版的《Organic Chemistry》

*通讯作者, Email: yangruolin@sjtu.edu.cn

(J. McMurry, 9th Edition)中的化合物也仍使用旧版的 IUPAC 名, 而 2013 年出版的《Organic Chemistry》(L. G. Wade, Jr., 8th Edition)则同时标注了化合物新、旧版本的 IUPAC 名, 但其使用的新 IUPAC 名并不是 2013 版, 因此某些化合物的 IUPAC 名与最新版仍有差异。

在医用有机化学教学中碰到的化合物名称差异有 4 种情况。第 1 种是化合物主碳链、后缀不变, 新、旧 IUPAC 名中仅基团和数字的书写顺序有变化, 如化合物 **1**–**4**^[2](图 1)。几乎除烷烃外的其他类型化合物的新、旧 IUPAC 名都存在这个问题。这种情况中 CCS 名与新、旧 IUPAC 名基本一致, 一般不会引起理解上的困惑。

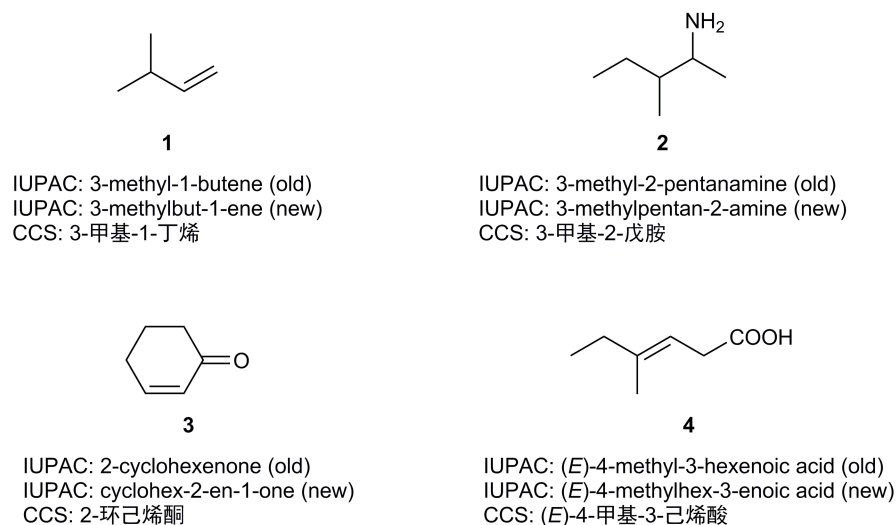


图 1 化合物新、旧 IUPAC 名及 CCS 名示例 1

第 2 种是主碳链改变, 后缀改变或不改变, 新、旧 IUPAC 名有较大差异。在教学中遇到的主要是烃基取代环烷烃和烃基苯。过去对这两类化合物的命名均视环与烃基的复杂程度决定主碳链的选择。如果烃基复杂就选烃基部分为主碳链, 如果烃基简单就选环作为主碳链。如化合物 **5** 在命名时选择边链为主碳链, 而化合物 **6** 选择环己烷为主碳链^[3](图 2)。但是对于烃基的复杂程度很难定义, 因此在教学中经常会碰到学生询问何时选择环作为命名母体, 何时选择边链为母体。新的《有机化学命名法》统一选择环作为命名母体, 很好地解决了这一问题。但因 CCS 名仍参照以前的命名原则, 导致这种以前选择边链为命名主体的化合物的新、旧 IUPAC 名及 CCS 名有较大差异, 学生在做习题时也会出现困惑, 如化合物 **5**、**7**、**8**^[4](图 2)。

第 3 种是具有末端双键或叁键的直链烃。在旧的 IUPAC 命名原则中, 烯、炔的命名优先度高于烷, 主碳链需要选择含有双键或叁键的最长碳链。而新的 IUPAC 命名原则中烷、烯、炔的命名优先度相同, 主碳链选择最长的碳链。这一命名原则的改变较大, 不仅涉及化合物 IUPAC 名的后缀, 而且涉及碳链长度和取代基的变化, 导致新、旧 IUPAC 名截然不同, 而 CCS 名仍参照以前的命名原则。这种类型的化合物也是命名类习题和讲解中经常出现的内容, 如化合物 **9**^[2]和 **10**^[5](图 3)。以前如果学生选择最长的碳链作为 IUPAC 命名母体是按照错误命名来处理, 但是按照新版 IUPAC 命名规则, 在这两个化合物中选择含有双键的最长碳链作为命名母体是不对的。而 CCS 命名仍需要选择含有双键的最长碳链。同样地, 对于化合物 **11** 和 **12**(图 3), IUPAC 命名也要选择最长的碳链为母体。如果不对命名规则进行解释, 学生对于这样的结果会感到非常困惑。

第 4 种是化合物命名母体彻底改变, 在教学中遇到的主要是非芳香杂环类化合物。如化合物 **13**, 以前采用芳香杂环体系命名为 tetrahydrofuran, CCS 名为四氢呋喃。新的 IUPAC 命名原则使用普通杂

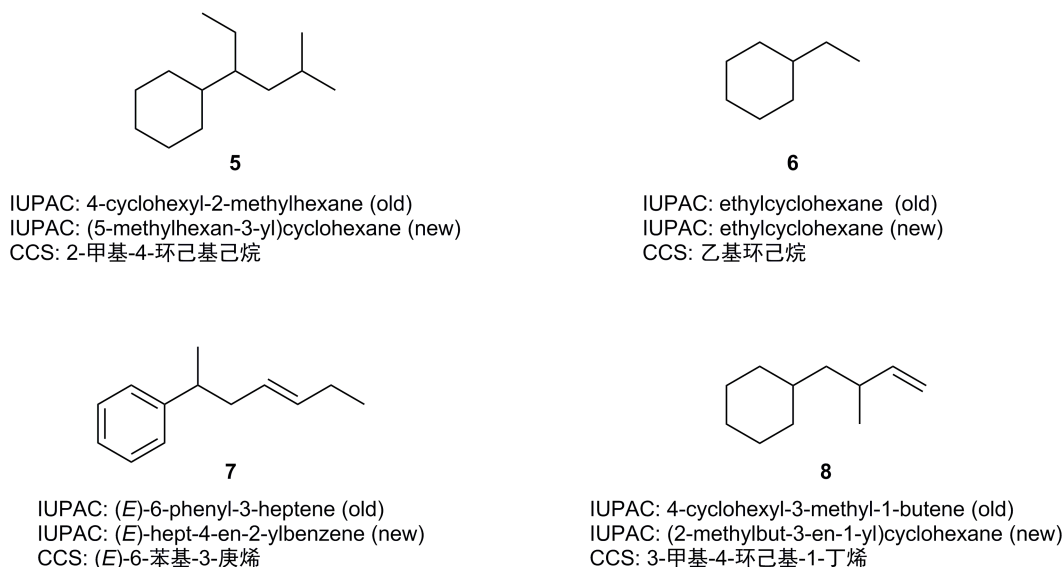


图2 化合物新、旧IUPAC名及CCS名示例2

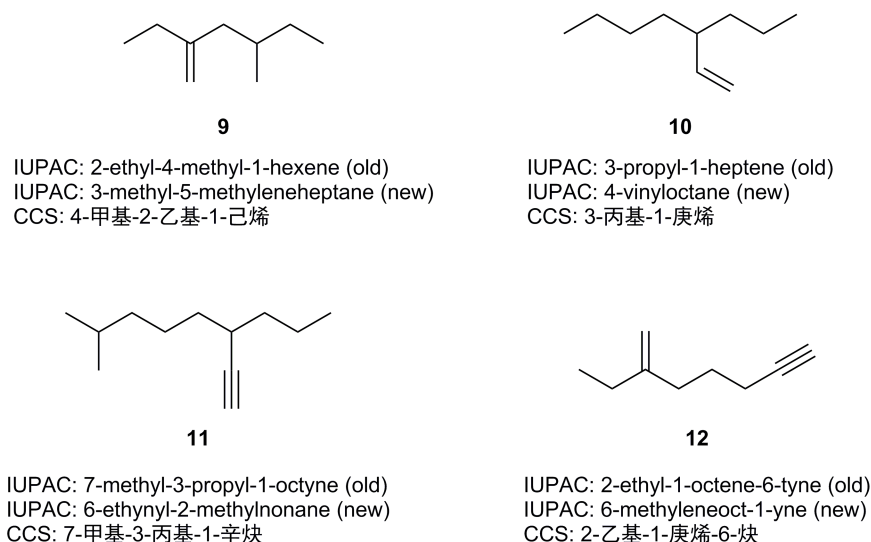


图3 化合物新、旧IUPAC名及CCS名示例3

环体系将其命名为oxolane(图4)。化合物14以前的IUPAC名采用tetrahydro-2*H*-pyran, 现在使用oxane(图4)。内酯和内酰胺类化合物以前按照羧酸衍生物进行命名, 现在均采用杂环命名原则。如化合物15是4-羟基丁酸形成的内酯, 旧IUPAC名为4-hydroxybutanoic acid lactone, CCS名为4-丁内酯, 新IUPAC名为oxolan-2-one(图4)。化合物16是(*R*)-4-甲基-5-氨基戊酸形成的内酰胺, 新IUPAC命名原则将其作为哌啶衍生物进行命名(图4)。这是新、旧命名原则中差异最大的一种情况。由于该类化合物的俗名和旧IUPAC名使用非常广泛, 新IUPAC名的推广还需要较长的时间。

由于很多国内外教材在当年编著时未能参考最新的《有机化学命名法》, 所以我们看到的大部分教材、参考书仍在使用旧的IUPAC命名规则, 但有些网站上的化合物名称、化工产品标签上的IUPAC名已进行了更新。此外, MCAT (Medical College Admission Test, 医学院入学考试)考试中仍有涉及化合物命名的测试题, 因此有必要向学生介绍IUPAC命名规则的变化。在教学中可以使用最新版ACD/ChemSketch软件(免费)对化合物进行命名, 然后在授课时进行补充。也可以在化学实验中开

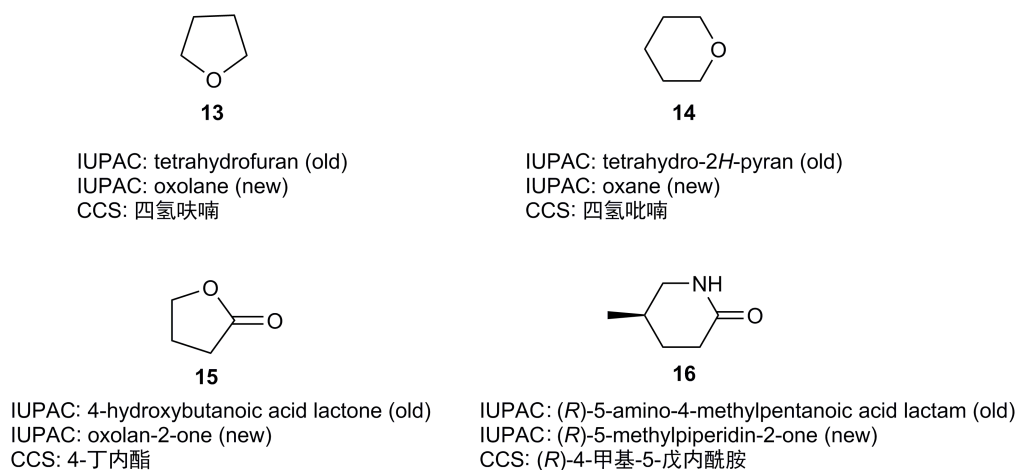
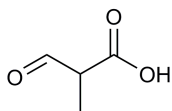


图4 化合物新、旧IUPAC名及CCS名示例4

设化学绘图软件课,告知学生如何获得化合物的新IUPAC名。同时在授课时须告知学生有机化合物名称的多样性及IUPAC、CCS命名原则的差异,以及由于各种原因,多种命名方式会在很长一段时间内同时存在和使用的现状。另外,也要让学生明确虽然一个结构可能对应多个化合物名,但一个正确的化合物名仅对应唯一的一个结构。

随着化学绘图软件的普及和自动命名系统的不断完善与更新,让学生掌握结构复杂化合物的IUPAC命名已渐无必要,因此在测试有机化合物结构与名称这一知识点时,测试的重点可以转为对化合物后缀名,即命名主官能团选择的考查,如例题1。也可以使用选择题来考查结构与化合物名,从而避开新、旧IUPAC名不一致及IUPAC名与CCS名不一致的问题,如例题2、3。另外,考虑到可能有一些学生会参加MCAT考试,在教学和测试中可以讲解和考查IUPAC名中主碳链编号及取代基书写顺序问题,如例题4。

例题1 如果不考虑前缀,下面化合物名的词尾应为:



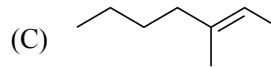
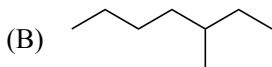
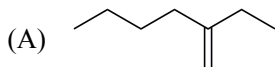
(A) 丙醛

(B) 丙醇

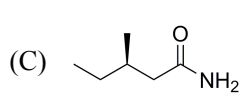
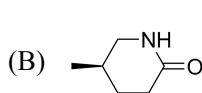
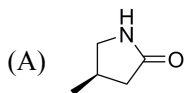
(C) 丙酸

(D) 丙酸酐

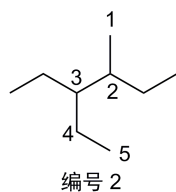
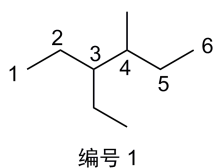
例题2 IUPAC名为3-methyleneheptane的化合物是:



例题3 (R)-4-甲基-5-戊内酰胺的结构是:



例题4 在IUPAC命名中主碳链编号方式正确的是：



(A) 编号 1

(B) 编号 2

(C) 编号 3

(D) 都不对

在教材和教辅材料编写时，根据化合物结构进行命名的习题可以考虑更换为根据化合物IUPAC名或CCS名来画结构的题目，这样既降低了化合物命名部分知识点的混乱程度，也适度减轻了学生的负担。

参 考 文 献

- [1] [2016-01-11]. http://sioc-journal.cn/Jwk_yjhx/CN/column/item98.shtml.
- [2] Wade, L. G., Jr. *Organic Chemistry*, 8th ed.; Pearson Education: Glenview, Illinois, USA, 2013.
- [3] 邢其毅, 裴伟伟, 徐瑞秋, 裴 坚. 基础有机化学. 第3版. 北京: 高等教育出版社, 2005.
- [4] 邢其毅, 徐瑞秋, 裴伟伟. 基础有机化学习题解答与解题示例. 北京: 北京大学出版社, 2004.
- [5] 伍越寰. 有机化学习题与解答. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 2003.