

一种通过剪断最短桥确定复杂桥环化合物主环的方法介绍

吴宏宇, 王智谦*

北京化工大学理学院, 北京 100029

摘要: 确定主环是命名复杂桥环化合物的难点所在。我们介绍一种“剪断最短桥, 显露最大环”的方法, 可以帮助学生快速准确地确定最大环的位置, 从而对复杂桥环化合物命名。

关键词: 复杂桥环化合物; 命名; 主环的确定; 剪断最短桥; 显露最大环

中图分类号: G64; O6

Finding the Main Ring of Polycyclic Structure through Cutting the Shortest Bridge

WU Hongyu, WANG Zhiqian*

College of Science, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, P. R. China.

Abstract: Determination of the main ring is the key to name a polycyclic structure. A method that features a “cutting the shortest bridge, uncovering the largest ring” was introduced. This method facilitates the main ring determination of a polycyclic structure. And this method is reliable and easy for students to master.

Key Words: Polycyclic structure; Nomenclature; Main ring determination; Cutting the shortest bridge; Uncovering the largest ring

桥环化合物的命名是大学本科有机化学教学的一个难点内容, 复杂桥环化合物的命名也是对学生深入理解命名规则的一个重要考查办法。按照命名原则, 对于含有副桥的复杂桥环化合物, 选取主环是确定主体结构并为环上碳原子编号的依据, 是破解复杂桥环化合物结构的关键所在。而能够被选择作为主环的结构, 应该是桥环体系中能够找出的最大的环。对于复杂桥环化合物命名规则介绍的报道有很多^[1-3], 但是都未对如何找到“最大的环”做具体的介绍, 各类《有机化学》教材中也并未做详细讲解。在此我们将介绍一种能够巧妙确定复杂桥环结构中“最大的环”的方法, 该方法不仅准确简单, 而且易于学生掌握。

仔细理解教材中讲述的桥环化合物命名的原则^[4], 我们可以看到, 该原则已经将桥环结构上的碳原子分为了两类, 一类是桥头碳原子, 一类是桥上碳原子(或称桥原子)。在桥环结构中所谓的一个环, 必然包含一对桥头碳原子和两个桥的结构。由此我们可以做这样一个推断, 由一对桥头碳原子和与之相连的两个最长桥组成的环, 就应该是桥环体系中的“最大环”了。因此, 如果我们剪断了最短的桥, 对于最大环的存在应该是没有影响的。不过, 这样的操作却可以简化多环结构, 并逐渐把最大环的位置显露出来。所以, 我们采取的确定复杂桥环结构中“最大的环”的方法是: 依次剪断体系中的“最短的桥”, 直到主环结构明显暴露。以这种方法确定出来的主环, 一定是体系中的最

大环，也就是正确的主环。

我们以教科书上经常选用的金刚烷结构主环的确定为例，来检验我们的方法，如图 1 所示。

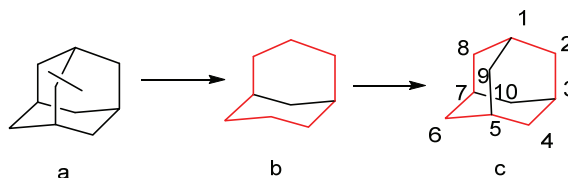


图 1 金刚烷的主环确定示意图

我们发现金刚烷结构中最短的桥有 6 个，都是一个碳的桥，因此随意选择其一切断得到图 1 中 b 的结构。得到的 b 的结构已经是一个二环的桥环结构了，其中最大的环已经非常明显地显露了出来，因此我们可以确定最大环是一个八元环，如图 1 中 c 所示。

对于结构更为复杂的桥环化合物 d 来说(图 2)，直接从化合物 d 的结构中确定最大环是相当有难度的，而采用我们的方法可以快速准确地确定主环。

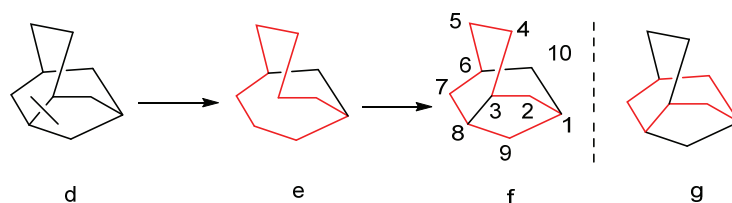


图 2 三环化合物的主环确定示意图

化合物 d 的结构中“最短的桥”是一个五元和六元稠环结构共用的一个“0 个碳”的桥，将其剪断我们得到图 2 中 e 的结构。e 的结构已经是一个二环结构了，其中的最大环已经很明显地显露出来，是一个如图 2f 所示的九元环。这样一来，化合物 d 的命名就可以确定为：三环[4.3.1.0^{3,8}]癸烷。如果不采用这种方法，让学生直接去判断 d 结构中的最大环时，学生往往会认为位于结构下方的七元环是最大环(图 2g)，而很难发现该化合物中暗藏的九元环结构。

该方法同样适用于对更为复杂多环体系命名时主环的确定，如图 3 所示的化合物 h 的命名。

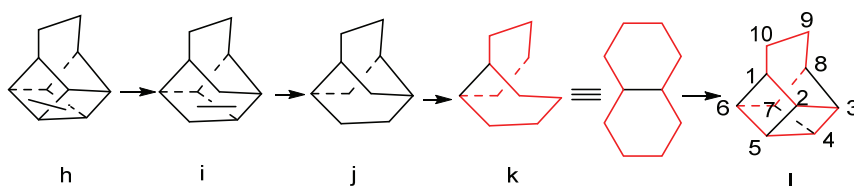


图 3 五环化合物的主环确定示意图

化合物 h 是一个五环化合物，存在 8 个桥头碳原子，通过直接观察确定主环的难度很大。这 8 个桥头碳原子之间存在的最短桥有 4 个，都是“0 个碳”的桥。采用我们的方法，任选其一剪断可得到图 3 中 i 的结构，但主环结构尚不明朗。我们继续剪断一个最短桥，可得到图 3 中的 j；再剪断一个最短桥，可得到图 3 中的 k。k 的结构已经是一个二环结构了，可以很明显地分辨出其中的最大环是图 3l 所示的十元环，从而化合物 h 的命名就可以确定为：五环[4.4.0.0^{2,5}.0^{3,8}.0^{4,7}]癸烷。

对复杂桥环化合物的命名可以帮助学生加深对命名规则的理解，从而深刻体会命名原则背后的

科学思想。希望我们介绍的这样一种“剪断最短桥，显露最大环”的方法，能够帮助广大学生准确又简洁地确定复杂桥环体系的最大环，进行正确命名，并深入领会解决科学问题时“化繁为简”思想的精妙之处。

参 考 文 献

- [1] 陈亚元. 大学化学, **1989**, 4 (3), 51.
- [2] 陈忠云. 大学化学, **1991**, 6 (2), 57.
- [3] 郑大贵. 大学化学, **1993**, 8 (6), 47.
- [4] 邢其毅, 裴伟伟, 徐瑞秋. 基础有机化学(上册). 第3版. 北京: 高等教育出版社, 2005: 45.