

浅议基于《有机化合物命名原则 2017》的复杂有机化合物命名教学

刘强*, 史玲, 刘志刚, 蔡双莲

湖南大学化学化工学院, 长沙 410082

摘要: 为了促进有机化合物命名教学的与时俱进, 总结了《有机化合物命名原则2017》在教学方面所做的重要修订之处。并对如何利用《有机化合物命名原则2017》新规范命名复杂有机化合物提出了具体教学建议。

关键词: 有机化合物; 有机化学; 命名; 教学

中图分类号: G64; O6

Brief Suggestions for Teaching Nomenclature of Complex Organic Compounds Based on *Nomenclature of Organic Compounds 2017*

LIU Qiang*, SHI Ling, LIU Zhigang, CAI Shuanglian

College of Chemistry and Chemical Engineering, Hunan University, Changsha 410082, P. R. China.

Abstract: In order to promote and keep pace with the teaching of new nomenclature of organic compounds, some important revisions about teaching organic nomenclature suggested in *Nomenclature of Organic Compounds 2017* were summarized. We proposed some concrete suggestions for using the new principles of the *Nomenclature of Organic Compounds 2017* to name the complex organic compounds.

Key Words: Organic compound; Organic chemistry; Nomenclature; Teaching

有机化合物的命名是有机化学教学的重要组成部分, 含多官能团的复杂有机化合物的命名一直是有机化学命名教学中的重点和难点^[1-4]。我国现行有机化合物的命名规则是1980年制定的《有机化学命名原则》(CCS1980)^[5], 它是根据国际纯粹和应用化学联合会(IUPAC) 1979年制定的命名方法修订的。近年来英国皇家化学学会出版了最新的《有机化学命名法》(*Nomenclature of Organic Chemistry-IUPAC Recommendations and Preferred Names 2013*) (IUPAC2013)蓝皮书^[6]。与IUPAC持续不断地更新命名规则相比, 30多年来, 我国相应的命名规则更新比较迟缓^[7]。而且, 现有的中文有机化合物命名规则存在着与英文命名规则和书写顺序不同等问题^[7-11]。这不仅影响了国际交流^[7], 也阻碍了双语教学和双语教材的建设和发展^[12,13], 不符合双一流建设背景下高等教育国际化的战略需求。此外, 将IUPAC推荐的更为成熟和精确的命名规则引入课堂教学, 既可提高教学内容科学性和严谨性, 又可促进有机化学教学的与时俱进^[14]。因此, 结合有机化合物命名新规来进行有机化学命名教学是十分有必要的。

收稿: 2018-01-08; 录用: 2018-01-19; 网络发表: 2018-01-25

*通讯作者, Email: qiangliu@hnu.edu.cn

基金资助: 湖南省普通高校教学改革研究项目(2017067)

最近,有部分教材^[15,16]和教学案例^[9]开始采用IUPAC新规,但中文名都还是沿用CCS1980,缺乏与之一致的中文有机化合物命名规范。2017年12月20日,中国化学会有机化合物命名审定委员会在IUPAC1993和IUPAC2013蓝皮书基础上编写的《有机化合物命名原则2017》(CCS2017)^[17]正式发布。本次修订在CCS1980简单规则基础上,做了更加细致和准确的补充和规定,特别是在有机化合物的命名规则和书写方面做了重要修改。

本文归纳总结了CCS2017新规在教学方面所做的重要修订之处,并结合有机化合物系统命名法的教学实际,对如何实施CCS2017新规进行教学提供建议,以供讨论。

1 《有机化合物命名原则 2017》的重要修订之处

1.1 取代基的排列顺序基于英文字母顺序^[7]

CCS2017 新规最重要的修订之处就是多个取代基书写的排列顺序。在 CCS1980 的命名原则中,各取代基的名称借用了立体化学次序规则,按取代基的优先顺序由小至大依次排列。由于取代基优先次序有时难以按立体化学次序规则确定,而且这一排列顺序还涉及位次编号问题,因此新规修订建议采用 IUPAC 的命名方法,按其英文字母顺序排列次序。具体例子请参考后续内容。

1.2 母体官能团和多重键位次号放在它们名称之前^[8]

在 CCS1980 的命名原则中,官能团和多重键(双键或叁键)的位次号放在主链碳原子数之前,CCS2017 则规定,母体官能团和多重键位次号放在它们名称之前,即位次号放在主链碳原子数之后。具体例子请参考后续内容。

2 有机化合物常见取代基的中英文名举例

鉴于 CCS2017 采用了基于英文字母顺序的取代基排列规则,学生需要掌握一些常见取代基的英文名称。结合教学实际,我们对常见取代基英文名称总结如下。

2.1 主链碳原子数的中英文命名

分子结构中十以下的碳原子个数一般用我国古代传统历法纪年中天干表示,十以上则用中文小写数字。这些天干的英文命名在母体官能团前直接用,若是取代基在英文名后加 yl (基)^[15,16]。

2.2 烃基的中英文命名

烃基的命名采用复杂支链取代基的命名方式,即烃上氢被取代后所连碳的位次为 1 位,然后依次编号和进行系统命名,名称后面加 yl (基)表示取代基。一些常见的烃基英文名称如表 1 所示。

2.3 母体官能团优先次序和作为取代基的中英文命名

CCS2017 新规的母体官能团优先次序与 CCS1980 基本一致,但烷烃和不饱和烃的优先次序不再是炔>烯>烷烃,而是处于同等优先次序。究竟谁最优取决于链长,最长主链上母体官能团才是优先基团。新规还列举了一些常见母体官能团作为取代基的英文名称,具体如表 2 所示。

3 复杂有机化合物名称的命名

3.1 基本书写格式

根据 CCS2017 的规定,一般有机化合物的命名包括取代基、主链碳原子个数(天干)、不饱和键(若有)和母体官能团,其书写基本格式如下(上行是总的书写格式,下行是对应四部分的详细书写格式):

取代基+主链碳原子数(天干)+不饱和键+母体官能团
取代基位次号+个数+名称+天干+烯或炔位次号+烯或炔+官能团位次号+个数+名称

表 1 烃基的中英文命名

结构式	CCS2017 中文名	CCS1980 中文名	IUPAC2013 英文名	中文俗名	英文俗名
$(\text{CH}_3)_2\text{CH}-$	丙-2 基 1-甲基乙基	1-甲基乙基	propan-2-yl	异丙基	isopropyl
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)-$	丁-2-基 1-甲基丙基	2-丁基 1-甲基丙基	butan-2-yl	仲丁基	sec-butyl
$(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2-$	2-甲基丙基	2-甲基丙基	2-methylpropyl	异丁基	isobutyl
$(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{CH}_2-$	3-甲基丁基	3-甲基丁基	3-methylbutyl	异戊基	isopentyl
$(\text{CH}_3)_3\text{C}-$	1,1-二甲基乙基	1,1-二甲基乙基	1,1-dimethylethyl	叔丁基	tert-butyl
$(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{CH}_2-$	3-甲基丁基	3-甲基丁基	3-methylbutyl	异戊基	isopentyl
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_2-$	1,1-二甲基丙基	1,1-二甲基丙基	1,1-dimethylpropyl	叔戊基	tert-pentyl
$(\text{CH}_3)_3\text{CCH}_2-$	2,2-二甲基丙基	2,2-二甲基丙基	2,2-dimethylpropyl	新戊基	neopentyl
$\text{CH}_2=\text{CH}-$	乙烯基	乙烯基	ethenyl		vinyl
$\text{CH}_2=\text{CHCH}_2-$	丙-2-烯基	2-丙烯基	prop-2-enyl	烯丙基	allyl
$\text{CH}_2=\text{C}(\text{CH}_3)-$	丙-1-烯-2-基	1-甲基乙烯基	prop-1-en-2-yl	异丙烯基	isopropenyl
C_6H_5-	苯基	苯基	phenyl		phenyl
$\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2-$	苯甲基	苯甲基	phenylmethyl	苄基	benzyl
$-\text{CH}_2-$	甲叉基	亚甲基	methylene	亚甲基	methylene
$(\text{CH}_3)_2\text{C}=\text{}$	丙-2-亚基	异丙亚基	propan-2-ylidene	异丙亚基	isopropylidene

表 2 母体官能团的优先次序和作为取代基的中英文命名^a

优先次序	基团	官能团名	取代基名	英文名
1	$-\text{COOH}$	酸	羧基	carboxy-
2	$-\text{SO}_3\text{H}$	磺酸	磺酸基	sulfo-
3	$-\text{COOR}$	酯	烷氧羰基	(R)-oxycarbonyl-*
4	$-\text{COX}$	酰卤	卤甲酰基	halocarbonyl-
5	$-\text{CONH}_2$	酰胺	氨基羰基(氨基甲酰基)	carbamoyl-
6	$-\text{CN}$	腈	氰基	cyano-
7	$-\text{CHO}$	醛	甲酰基	formyl-
8	$-\text{CO}-$	酮	氧亚基(氧代)	oxo-
9	$-\text{OH}$	酚、醇	羟基	hydroxyl-
10	$-\text{NH}_2$	胺	氨基	amino-
11	$-\text{C}\equiv\text{C}-$	炔	炔基	ynyl-
11	$-\text{C}=\text{C}-$	烯	烯基	enyl-
11	$-\text{R}$		烷基	(R)-yl-*
12	$-\text{OR}$	醚	烷氧基	(R)-oxy-*
	$-\text{X} (-\text{F}, -\text{Cl}, -\text{Br}, -\text{I})$		卤-(氟-, 氯-, 溴-, 碘-)	halo- (fluoro-, chloro-, bromo-, iodo-)
	$-\text{NO}_2$		硝基	nitro-

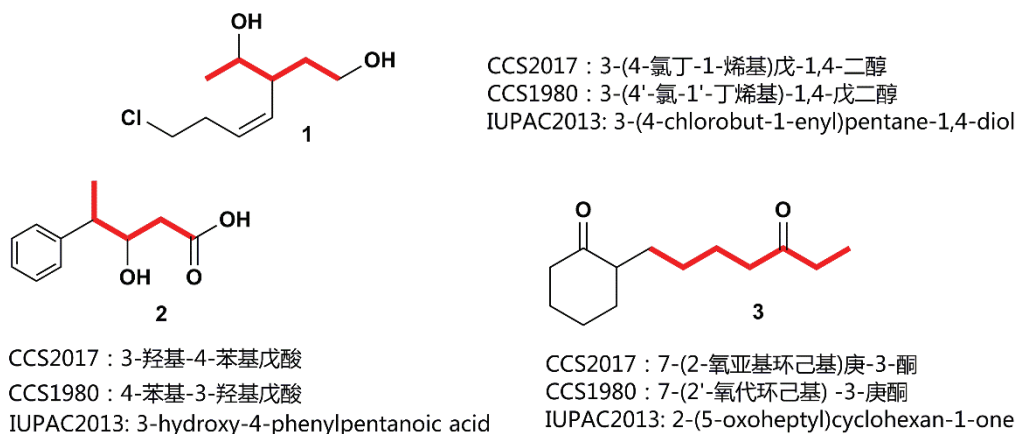
^a 括弧内为 CCS1980 中文命名; *R 为天干英文名

母体官能团是用于分子结构命名的特性基团, 也称主体基团。虽然有文献^[11]认为官能团和特性基团的概念不一样, 但鉴于学生的学情, 我们在这里仍把特性基团当作官能团来看待。在 CCS2017 的新规中也把官能团作为特性基团的俗称^[17]。当分子中有多个官能团时, 表 2 中排在前面的官能团

总是主体基团(母体官能团),剩下的官能团和其他原子或基团都是取代基。卤素、硝基一般不作为母体官能团,而作为取代基看待。不饱和键是主链上所含的烯或炔等化学键。在这里要注意阿拉伯数字之间用“,”隔开,阿拉伯数字和汉字间要用短横隔开“-”。

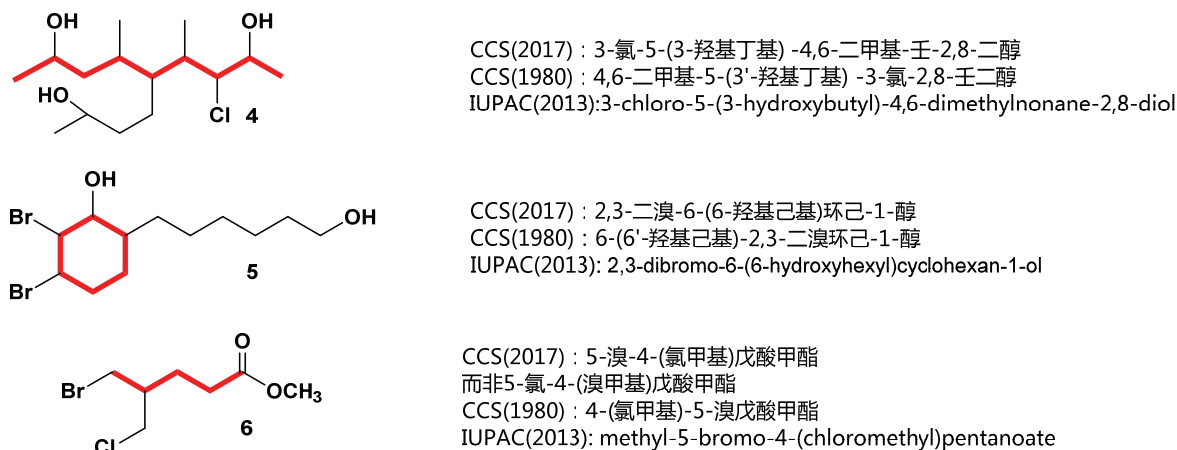
3.2 主链和不饱和键的选择

a) 选取含尽可能多最优母体官能团和多重键(双键和三键)的最长碳链或环为主链(环),若最优母体官能团和多重键数目相同,则再比较取代基或碳原子多少,多者作为主链(环)。如下图中化合物1-3所示。

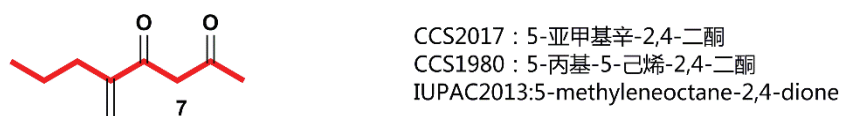


在化合物3命名中需要注意的是, IUPAC2013 优先考虑环而不是链作为主链, CCS2017 没有采用。

b) 选取含尽可能多取代基的碳链(环)为主链(环), 其次兼顾取代基的位次小和英文字母顺序排前。如下图中化合物4-6所示。

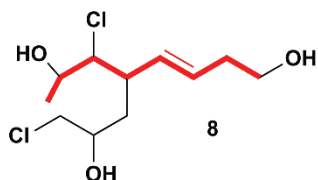


c) 与 CCS1980 命名方式不同, CCS2017 新规规定链状化合物的主链取决于碳链长度, 而不是是否包含多重键。如下图中化合物7所示。



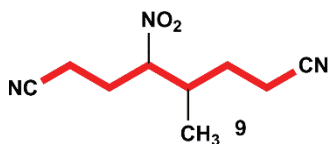
3.3 母体官能团和取代基的编号

a) 总的原则：母体官能团编号位次最小，其次多重键(双键和叁键)的位次最小，再兼顾双键位次最小，最后要求取代基位次最小。如下图中化合物 **8** 所示。



CCS2017 : 6-氯-5-(3-氯-2-羟基丙基)辛-3-烯-1,7-二醇
而非8-氯-5-(1-氯-2-羟基丙基)辛-3-烯-1,7-二醇
CCS1980 : 6-氯-5-(2'-羟基-3'-氯丙基)-3-辛烯-1,7-二醇
IUPAC2013: 6-chloro-5-(3-chloro-2-hydroxypropyl)oct-3-ene-1,7-diol

b) 取代基编号遵循最低系列原则(lowest series principle)。取代基从两端编号，逐个比较最先遇到的位次最小者，定为最低系列。当取代基位次相等，从英文字母排列在前一端编号。如下图中化合物 **9** 所示。

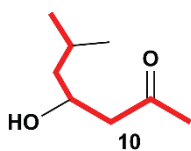


CCS2017 : 4-甲基-5-硝基辛二腈
而非4-硝基-5-甲基辛二腈
CCS1980 : 4-甲基-5-硝基辛二腈
IUPAC2013: 4-methyl-5-nitrooctanedinitrile

c) 支链有复杂取代基，从主链相连碳开始编号为 1，将支链碳原子进行编号，如化合物 **1**、**3**、**4**、**5**、**8** 所示。

3.4 取代基的排序

a) 多个取代基排列须逐个比较英文字母按字母顺序排列。取代基个数复数字头(di、tri、tetra 等)和斜体字头 *sec* 和 *tert* 不计入字母顺序，如下图中化合物 **10** 所示。但是支链复杂取代基复数字头计入字母顺序，如下图中化合物 **11** 所示。

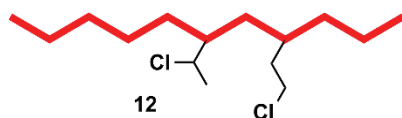


CCS2017 : 4-羟基-6-甲基庚-2-酮
CCS1980 : 6-甲基-4-羟基-2-庚酮
IUPAC2013: 4-hydroxy-6-methylheptan-2-one



CCS2017 : 5-(1,2-二氟丙基)-3-乙基癸烷
CCS1980 : 3-乙基-5-(1',2'-二氟丙基)癸烷
IUPAC2013: 5-(1,2-difluoropropyl)-3-ethyldecane

b) 若取代基英文名称相同则比较位次号，按位次号由小到大排列，如下图中化合物 **12** 所示。



CCS2017 : 6-(1-氯乙基)-4-(2-氯乙基)十一烷
CCS1980 : 4-(2'-氯乙基)-6-(1'-氯乙基)十一烷
IUPAC2013: 6-(1-chloroethyl)-4-(2-chloroethyl)undecane

4 教学建议

对于有机化合物系统命名的初学者来说，取代基按英文字母排序是一大难点。而且有机化合物命名新规的命名方法细而多，学生需要一定量的练习才能掌握。由于学生对取代基的英文名的学习和记忆有一定难度，建议采用翻转课堂和游戏化教学策略，通过课前学生对命名方法的自主学习，课堂卡片游戏和团队竞争性游戏等游戏化教学^[1,2]和课后 ChemDraw 软件可视化纠错学习来强化学

生对命名新规的记忆和理解。具体操作如下。

课前教师将准备好的 CCS2017 命名课件与相关团队测试题发放给学生, 学生通过小组进行团队学习。由于现行有机化学教材和文献存在多种命名规则并行的现象, 建议在课件中把 CCS2017 和 CCS1980 以及 IUPAC2013 的命名方法同时列出(如上述实例所示), 并对它们的主要区别和联系加以说明, 特别是对英文字母排序和立体化学次序规则排序的区别, 以方便学生在自主学习过程中查阅文献时对存在的多种命名方法了然于胸。同时, 英文名的列出还有利于学生对取代基英文名的记忆。

课堂上通过卡片游戏和团队竞争性游戏等游戏化教学方式, 加深学生对取代基中英文名称的记忆和对取代基正确排序的理解。教师可将官能团、取代基、天干、相关量词中英文名和不同有机化合物结构式制成扑克牌的形式(图 1), 课中发放给各小组。有机化合物命名游戏教学可以采取两种方式: 一种是团队内竞争游戏, 另一种是团队间竞争游戏。团队竞争游戏一般 4 人一组, 团队内竞争游戏是根据有机化合物结构式查找取代基、天干和相关量词中英文名。通过不断给出不同有机化合物的结构式, 要求组员快速给出取代基、天干和相关量词中英文名的扑克牌。晋级方式采用世界杯足球赛晋级方式。团队间竞争游戏是给有机化合物快速命名。教师由简到难给出不同有机化合物结构式, 要求小组在有限时间内正确排出取代基、天干、官能团中英文名和各自位次数字的顺序。晋级方式采用两组 PK 方式。

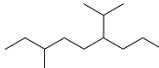
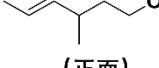
酸  COOH	烯  C=C	丙-2基  isopropyl	羟基  hydroxyl	 (正面) 6-异丙基-3-甲基壬烷 6-isopropyl-3-methylnonane (反面)
甲  meth	十二  dodec	二  di	 4	 (正面) 3-甲基己基-4-烯-1-醇 3-methylhex-4-en-1-ol (反面)

图 1 有机化合物命名游戏扑克牌举例

课后发放练习题, 鼓励学生在练习过程中使用 ChemDraw Professional 16.0 软件(免费试用)命名功能对不太有把握的化合物名称进行验证和强化。通过这种可视化学习途径, 不仅可以对错误命名方法进行更正, 还可对正确命名方法获得积极的心理体验, 加深学生对正确命名方法的印象。

参 考 文 献

- [1] Moreira, R. F. *J. Chem. Educ.* **2013**, 90 (8), 1035.
- [2] Calvo Pascual, M. A. *J. Chem. Educ.* **2014**, 91 (5), 757.
- [3] 沈爱宝, 吴锦明. 大学化学, **2014**, 29 (6), 62.
- [4] 严赞开. 化学教育, **2005**, 26 (6), 54.
- [5] 中国化学会. 有机化学命名原则. 北京: 科学出版社, 1983.
- [6] Favre, H. A.; Powell, W. H. *Nomenclature of Organic Chemistry, IUPAC Recommendations and Preferred Names 2013*, 1st ed.; The Royal Society of Chemistry: Cambridge, UK, 2013.

-
- [7] 孙贺平, 吴毓林. 大学化学, **2014**, 29 (5), 47.
- [8] 孙贺平, 吴毓林. 大学化学, **2015**, 30 (2), 61.
- [9] 林琦, 姚莉韵, 杨若林. 大学化学, **2017**, 32 (3), 55.
- [10] 贾洪斌. 大学化学, **2011**, 26 (1), 73.
- [11] 曹忠民. 有机化学研究, **2017**, 5 (3), 142.
- [12] 张丕显, 陈图史. 中国现代医学杂志, **2002**, 12 (13), 108.
- [13] 王梅, 高占先, 姜文凤. 中国大学教学, **2009**, No. 3, 94.
- [14] 陈超越, 何杰, 石建军, 谭德新. 化学教育, **2015**, 36 (8), 73.
- [15] Carey, F. A.; Giuliano, R. M. *Organic Chemistry*, 10th ed.; McGraw-Hill: New York, 2016.
- [16] Bruice, P. Y. *Organic Chemistry*, 8th ed.; Pearson Education, Inc.: New Jersey, 2016.
- [17] 中国化学会. 有机化合物命名原则2017. 北京: 科学出版社, 2017.