

关于命名术语“母体氢化物”和“特性基团”的探讨

李小瑞, 赵艳娜*, 姚团利, 南江, 张金

陕西科技大学化学与化工学院, 西安 710021

摘要: 较详细地探讨了命名术语“母体氢化物”和“特性基团”的概念、含义及其对命名有机化合物的重要意义。通过大量实例说明, 用母体氢化物(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, 可以更系统、更方便、更清晰地命名有机化合物; 用特性基团(characteristic group)代替官能团(functional group)来命名有机化合物, 使每个原子只能被描述一次, 不能被重复描述, 从而更加准确地命名有机化合物。

关键词: 有机化合物系统命名法; 母体氢化物; 特性基团; CCS-2017规则

中图分类号: G64; O6

Discussion of Nomenclature: “Parent Hydride” and “Characteristic Group”

Xiaorui Li, Yanna Zhao*, Tuanli Yao, Jiang Nan, Jin Zhang

College of Chemistry and Chemical Engineering, Shaanxi University of Science and Technology, Xi'an 710021, China.

Abstract: We discuss in detail the meaning of “parent hydride” and “characteristic group”, two terms used in organic chemistry. Through numerous examples, we demonstrate that nomenclature based on parent hydrides is superior in terms of convenience, systematization, and clarity. We also propose that “characteristic group” is a more accurate term than the commonly used “functional group” because each atom can only be described once.

Key Words: Nomenclature of organic compounds; Parent hydride; Characteristic group; CCS-2017 rules

自2017年12月中国化学会正式发布《有机化合物命名原则2017》^[1](以下简称为CCS-2017)以来, 国内陆续有对CCS-2017进行解读或梳理的教学论文^[2–13]发表, 也有按照CCS-2017命名的教材^[14–18]出版, 对实施CCS-2017起到了积极的推动作用。但这些论文或教材较多关注“前缀按照英文字母顺序列出”和“官能团位次紧挨在官能团名称之前”等^[2,3,4]格式规定, 没有对“母体氢化物”和“特性基团”这两个CCS-2017中最重要的改变进行深入的思考和讨论, 导致产生了“新规则将官能团改称为特性基团”“特性基团约等于官能团”的误解以及“为什么新规则中没有将C=C和C≡C列入官能团”的疑虑。本文将对“母体氢化物”和“特性基团”的概念、含义及其在有机化合物命名中的重要性进行较为详细深入的探究。

1 母体氢化物的含义及其重要意义

1.1 母体氢化物的含义

母体氢化物(parent hydride)指无分叉的无环结构或环状结构, 以及具有俗名或半系统命名的无

收稿: 2022-02-22; 录用: 2022-04-15; 网络发表: 2022-04-29

*通讯作者, Email: zhaoyan@sust.edu.cn

基金资助: 国家自然科学基金面上项目(22179075, 22171171); 陕西省一流课程建设项目(有机化学)陕教[2021] 107; 陕西科技大学教改项目(21Y074); 陕西科技大学首批在线开放课程(有机化学)

环或有环结构，而其上仅连接有氢原子的化合物^{[1]21,[5,6]}。以下主要用基础有机化学命名教学中最重要的取代操作法说明母体氢化物的含义^[7]。

取代名是IUPAC命名法和CCS-2017命名原则中最常见、最重要的系统命名，其构成一般为：前缀+母体氢化物+后缀^{[1]23}。这种命名构成具有现代汉语合成词中只含有一个词根的附加式构词法“前缀+词根+后缀”的特点，从构词学的角度来讲，某个有机化合物的命名实际上就是一个合成名词，其词根是“母体氢化物”。无论英语还是汉语，词根都是表示词的基本词义的语素，因此可以说：“母体氢化物”是有机化合物命名的基础和出发点^{[1]44}。

表1中化合物1-6是无分叉无环结构作为母体氢化物的具体实例。以 $\text{C}_2\text{H}_5\text{CH}(\text{NH}_2)\text{CH}_3$ 的命名为例， $\text{C}_2\text{H}_5\text{CH}(\text{NH}_2)\text{CH}_3$ 的结构是丁烷分子中C2上的一个氢原子被 $-\text{NH}_2$ 取代，因此该化合物的母体氢

表1 母体氢化物和官能性母体举例

序号	待命名化合物	母体氢化物结构 或官能性母体结构	前缀或后缀	CCS-2017中文名称及英文名称
1			CH_3- , $\text{CH}_2=$ 甲基和甲亚基只能作前缀； 前缀按英文字母排序 ^{[1]46,166}	3-甲基-4-甲亚基庚烷 3-methyl-4-methylenheptane
2			$\text{Br}-$, 卤原子只能作前缀	2-溴丁烷 2-bromobutane
3			NH_2- , 既可作前缀，亦可作后缀。此处作后缀，称为“胺”	丁烷-2-胺(亦可简称为：丁-2-胺) butan-2-amine
4			$\text{O}=\text{}$, 既可作前缀，亦可作后缀。此处作后缀，称为“酮”	丁烷-2-酮(亦可简称为：丁-2-酮) butan-2-one
5	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2-\text{COOH}$		$-\text{COOH}$, 此处作后缀，称为“酸”	丁酸 butyric acid
6	$\text{CH}_3\text{CH}=\text{CH}-\text{CHO}$		$-\text{CHO}$, 此处作后缀，称为“醛”	丁-2-烯醛 but-2-enal
7			$-\text{COOH}$ 作为后缀； $-\text{COOH}$ 连在环上，称为“甲酸”	环己烷甲酸 cyclohexanecarboxylic acid
8			CH_3- 只能作前缀， NH_2- 作后缀，称为“胺”	6-甲基环己-3-烯-1-胺 6-methylcyclohex-3-en-1-amine
9			NH_2- 作前缀，称为“氨基”， phenol为官能性母体	4-氨基苯酚 4-aminophenol
10		$\text{H}-\text{CH}_2\text{COOH}$ (乙酸) (英文为俗名，中文为系统命名)	 作为前缀， 称为“2,4-二氯苯氧基”， acetic acid为官能性母体	2-(2,4-二氯苯氧基)乙酸 2-(2,4-dichlorophenoxy)acetic acid
11			CH_3- , 烷基只能作前缀	3-甲基-1H-吲哚 3-methyl-1H-indole (1H表示在1-位上有“额外氢”)

化物是丁烷(butane)。根据CCS-2017中表4-1和表5-2中关于特性基团的规定,此时应将C2上的 -NH_2 作为后缀,称为“胺”,则该化合物应该命名为丁烷-2-胺(butan-2-amine),其英文名称更清楚地表明该化合物的母体氢化物是“butane”。将“丁烷-2-胺”中的“烷”字省略时,不会引起误解或混淆,故该化合物也可命名为丁-2-胺。

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{-COOH}$ 分子中的特性基团 -COOH 中含有单个的 sp^2 杂化碳,在确定母体化合物时可认为是一 COOH 取代了丁烷分子中的末端 -CH_3 ^{[1]212},所以 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{-COOH}$ 的母体氢化物是丁烷,取代名是丁酸。同理, $\text{CH}_3\text{CH=CH-CHO}$ 的母体氢化物是 $\text{CH}_3\text{CH=CH-CH}_3$,取代名是丁-2-烯醛。

化合物7和化合物8是无分叉环状结构作为母体氢化物的具体实例。以化合物8为例,作为词根的母体氢化物是环己烯,故被命名为6-甲基环己-3-烯-1-胺(注意:这里的编号是被命名化合物整体的编号,而不是母体氢化物的编号)。

化合物9和化合物10是官能性母体^{[1]22}为母体结构的简单实例。官能性母体可以理解为:具有英文俗名的、含有一个或多个特性基团的化合物。例如,环己醇(cyclohexanol)不能称为官能性母体,因为“cyclohexanol”不是英文俗名,而是官能化的母体氢化物;英文中乙酸(acetic acid)、苯胺(aniline)、苯酚(phenol)等因采用俗名命名,故也归于官能性母体,但是这些化合物的中文命名却使用系统命名。

而化合物10、11则分别是有俗名的无环结构、有俗名的环状结构为母体氢化物的具体实例。

有机化合物的母体氢化物除了最主要的碳氢化合物(烃)以外,还可以是杂原子的氢化物,如氮烷、氮烯、硅烷等^{[1]44,173-177}。例如, $(\text{HOCH}_2\text{CH}_2)_3\text{N}$ 俗称三乙醇胺(triethanolamine),如果采用取代操作法,以乙烷为母体氢化物,根据特性基团优先次序规则,作为后缀的主特性基团应该是一 OH ,其取代名应该为2,2',2''-氨基三(乙烷-1-醇)[2,2',2''-nitrilotris(ethan-1-ol)],这个命名显然有点繁琐复杂。但是如果以氮烷(NH_3 , azane)为母体氢化物^{[1]44,[1]},将其命名为三(2-羟基乙基)氮烷[tris(2-hydroxyethyl)azane]则更为方便简单、一目了然。

1.2 “母体氢化物”的重要意义

CCS-2017反复强调^{[1]前言,28,44}:使用母体氢化物统一处理有机化合物的命名是其最主要的改变,母体氢化物是命名有机化合物的基础和出发点;全书花费巨大篇幅^{[1]44-141}专门阐述“母体氢化物以及由此形成的取代基”;贯穿全书的大量实例亦充分表明:按照取代操作法或者其他操作法(如置换法、加合法等等)命名有机物时,首先要确定母体氢化物作为词根,然后再根据该化合物中所含的取代基和特性基团加上前缀或后缀,用以精确表达由母体化合物到真实化合物之间的结构差异,最后形成有机化合物的命名。

1.2.1 使用“母体氢化物”处理命名是CCS-2017最根本的改变

根据CCS-2017,以 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}(\text{NH}_2)\text{CH}_3$ 为例,其命名有三种方法^{[1]178,[1]}:(a)以氮烷(NH_3)为母体氢化物,将其命名为丁-2-基氮烷。此法用得较少;(b)以丁烷为母体氢化物,将其命名为丁烷-2-胺。此法为IUPAC-2013优先建议的命名,也是基础有机化学课堂理论教学应该优先讲解的命名;(c)将“胺”字加到取代基R名的后面构成,将其命名为丁-2-基胺。

如果没有母体氢化物的概念,会觉得“丁烷-2-胺”这个命名很别扭。这是因为我们已经习惯了按照官能团命名的思维方式,认为这是一个含有4个碳的、 -NH_2 连在C2上的胺类化合物,采用CCS-2017规定的格式,应该叫做“丁-2-胺”。但是如果以“母体氢化物”的思维方式来处理该化合物的命名,那么 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}(\text{NH}_2)\text{CH}_3$ 就应该理解为丁烷分子中C2上的一个氢原子被 -NH_2 取代了,“胺”字只是作为后缀,作为词根的母体氢化物是“丁烷”而不是“丁”,因此 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}(\text{NH}_2)\text{CH}_3$ 被命名为“丁烷-2-胺”(butan-2-amine)也就顺理成章了。

按照“母体氢化物”的思维方式, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COCH}_3$ 是丁烷分子中C2上的两个氢原子被一个二价的特性基团 $=\text{O}$ 所取代所形成的化合物,应该被命名为丁烷-2-酮(butan-2-one),作为词根的母体氢化物

是丁烷,“酮”在这里只是后缀(=O),并不是含有羰基官能团的意思。同理, $\text{CH}_2=\text{CHCH}(\text{OH})\text{CH}_3$ 是 $\text{CH}_2=\text{CHCH}_2\text{CH}_3$ 分子中的 α -H被—OH取代后所形成的化合物,其母体氢化物是丁烯,故被命名为丁-3-烯-2-醇(but-3-ene-2-ol),“醇”在这里是以特性基团—OH作为后缀的意思。

中国化学会《有机化学命名原则1980》^[19](以下简称为CCS-1980)中并没有“母体氢化物”的概念和术语,只是在命名开链化合物时有“选主链”以及在命名多官能团化合物时有“确定母体化合物”的说法。但是用CCS-2017命名有机化合物时,首先要确定母体氢化物的结构和名称,以其作为命名有机物的基础和出发点^{[1]44}。因此,使用母体氢化物统一处理有机化合物的命名才是CCS-2017最根本的改变。

1.2.2 使用“母体氢化物”可以更加系统地命名有机化合物

(1) 如果采用“前缀+母体氢化物+后缀”的构成方式,以“母体氢化物”的思维方式来处理有机化合物的命名,可以使有机化合物的命名更加系统化。表1中列举的化合物也试图说明:命名各类有机化合物时,以母体氢化物的命名为出发点,经过前缀或后缀的修饰,都能够形成准确描述被命名化合物结构的取代名。

(2) 除了表1中列出的一些采用取代操作法命名的化合物外,采用其他操作法命名有机化合物也可以形成“前缀+母体结构+后缀”的构成方式。表2是采用其他操作法命名的几个简单实例。

表2 其他操作法命名举例

序号	待命名化合物	母体氢化物	操作方法	前缀或后缀	CCS-2017中文名称及英文名称
12		$\text{H}_2\text{C}-\text{CH}_2$ (环己烷)	置换操作法 ^{[1]30}	“1,4-二氧杂”作为前缀	1,4-二氧杂环己烷(置换名) 1,4-dioxacyclohexane 1,4-dioxane (俗名, IUPAC优先推荐)
13			置换操作法	“1,4-二氮杂”作为前缀	1,4-二氮杂环庚三烯 1H-1,4-diazacyclohepta-2,4,6-triene 1,4-二氮杂环庚炔(CCS-2017优先推荐) 1,4-diazepine
14			加合操作法 ^{[1]31}	“1,2,3,4-四氢”作为前缀	1,2,3,4-四氢萘 1,2,3,4-tetrahydronaphthalene
15			缀合操作法 ^{[1]34}	—OH, 作后缀; Methanol为官能化的母体氢化物	环己烷甲醇 cyclohexanemethanol

(3) 根据CCS-2017,重氮化合物和偶氮化合物的命名亦可用“母体氢化物”来统一处理。命名这类化合物时仍然要首先确定母体氢化物的结构和名称,然后加以前缀、后缀以及特定用字的修饰,最后形成该化合物的命名。如表3所示。

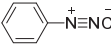
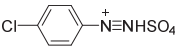
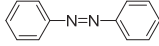
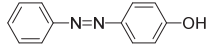
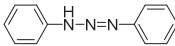
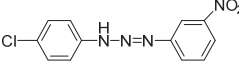
化合物22、23是氨基取代的芳香族重氮化合物,若按照CCS-1980命名这类化合物时很容易产生歧义和疑虑;但是按照CCS-2017命名这两个化合物,将其视为“丙氮烯”的衍生物,则思维方式非常简单,很容易处理,即使两个苯环上含有更多的取代基,亦不会产生歧义和疑虑。

1.2.3 使用“母体氢化物”可以更加方便地命名有机化合物

“慢”和“蕃”都是CCS-2017新增补的术语,都属于“母体氢化物”的范畴。

(1) 慢环环系(mancude-ring systems)是指含有最大非累积双键数的不饱和环系^{[1]48-54,[7,8]}。如图1所示,“慢”属于无分叉环状结构的母体氢化物。环状多烯、轮烯、并环环系以及含有双键的杂环化合物等,都可以方便简捷地用“慢”命名,其中用阿拉伯数字标明的编号是按照慢环环系进行的编号,斜体氢(H)表示“额外氢”^{[1]42}。

表3 重氮和偶氮化合物命名举例

序号	待命名化合物	CCS-1980中文名称	CCS-2017中文名称及英文名称	解释或说明
16	$\text{CH}_2=\text{N}^+\text{N}^-$	重氮甲烷	重氮甲烷 diazomethane	重氮化合物的命名原则 ^{[1]177} : “重氮”+母体氢化物名称
17	$\text{CH}_3\text{CH}_2-\text{N}^+\text{N}^-\text{Cl}$	重氮乙烷盐酸盐	氯化乙烷重氮盐 ethanediazonium chloride	重氮盐的命名原则 ^{[1]176} : 负离子名+前缀+母体氢化物+
18		重氮苯盐酸盐 或者: 氯化重氮苯	氯化苯重氮盐 benzenediazonium chloride	“重氮盐”
19		4-氯重氮苯硫酸盐	硫酸氢-4-氯苯重氮盐 4-chlorobenzenediazonium hydrogen sulfate	
20		偶氮苯	1,2-二苯基乙氮烯 1,2-diphenyldiazene	以“乙氮烯”(HN=NH, diazene) 为母体氢化物 ^{[1]173-177}
21		对羟基偶氮苯	4-(苯基乙氮烯基)苯酚 4-(phenyldiazenyl)phenol	“phenol”为官能性母体, “乙氮烯基”作为前缀 ^{[1]175}
22		苯氨基重氮苯	1,3-二苯基丙氮-1-烯 1,3-diphenyltriazen-1-ene	以“丙氮烯”(HN=N-NH ₂ , triazene)为母体氢化物
23		对氯苯氨基间硝基重氮苯	3-(4-氯苯基)-1-(3-硝基苯基)丙氮-1-烯 3-(4-chlorophenyl)-1-(3-nitrophenyl)triazen-1-ene	

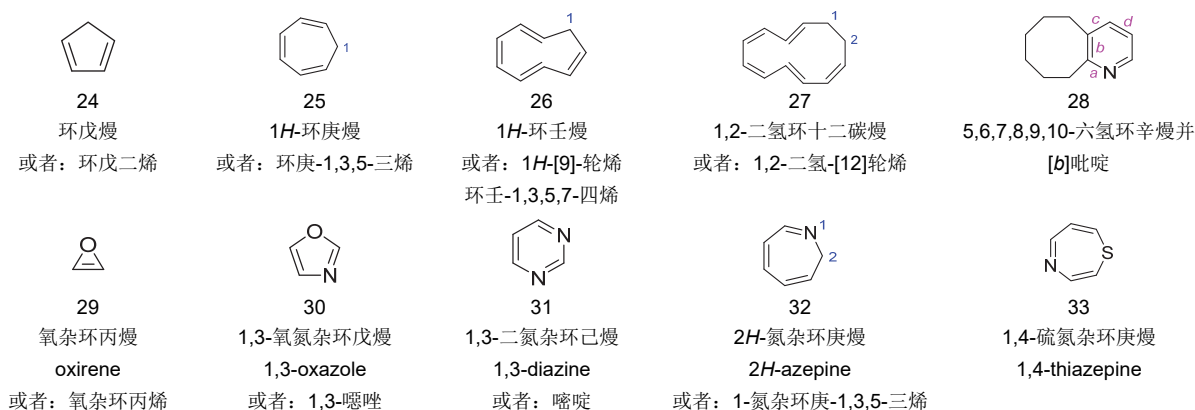


图1 二氢环系化合物命名举例

化合物28是一个并环环系化合物,其英文名称为5,6,7,8,9,10-hexahydrocycloocta[b]pyridine,其中的“cycloocta-”是八元的碳氢二烯环的意思^{[1]48,[8]},故其中文命名为“5,6,7,8,9,10-六氢环辛二烯并[b]吡啶”。

化合物29-33为含双键杂环化合物的命名实例。尽管化合物30、31仍然可以沿用噁唑、嘧啶等音译俗名,但其专业性很强,不能做到“望文生义”,难记、易错;化合物32也可以“环庚-1,3,5-三烯”作为母体氢化物,但是其编号是使杂原子和双键的位次最小,已经不同于用二氢环系作为母体氢化物时将杂原子和额外氢的编号最小^[9]。

显而易见,用慢环对含双键杂环化合物进行中文命名^{[1]50-54,[5,7-9]}非常简捷,命名与结构间的对应性强,不需要特别记忆,具有很强的规律性和系统性;其英文命名很容易根据CCS-2017表3-3^{[1]50}和表3-5^{[1]52}得到,中英文间的互换非常方便,便于国际交流,授课教师应该积极推广这一名称。

(2) 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^{[1]115,[5,9]}。虽然蕃类化合物的命名也可通过其中的其他环系母体氢化物进行,但一般情况下用“蕃母体氢化物”命名更为简单明了。蕃命名的要点是先将节点关键处的环或环系简化为“超原子”,得到容易命名的“简化骨架名”,然后再引入扩展前缀,加上超原子的位次和扩展体的接合位次,形成蕃母体氢化物的名称^{[1]116}。如图2中化合物34、35的命名所示。

有了蕃母体氢化物,蕃类化合物就很容易命名了^{[1]115-125},图3给出了三个环蕃类化合物的命名。

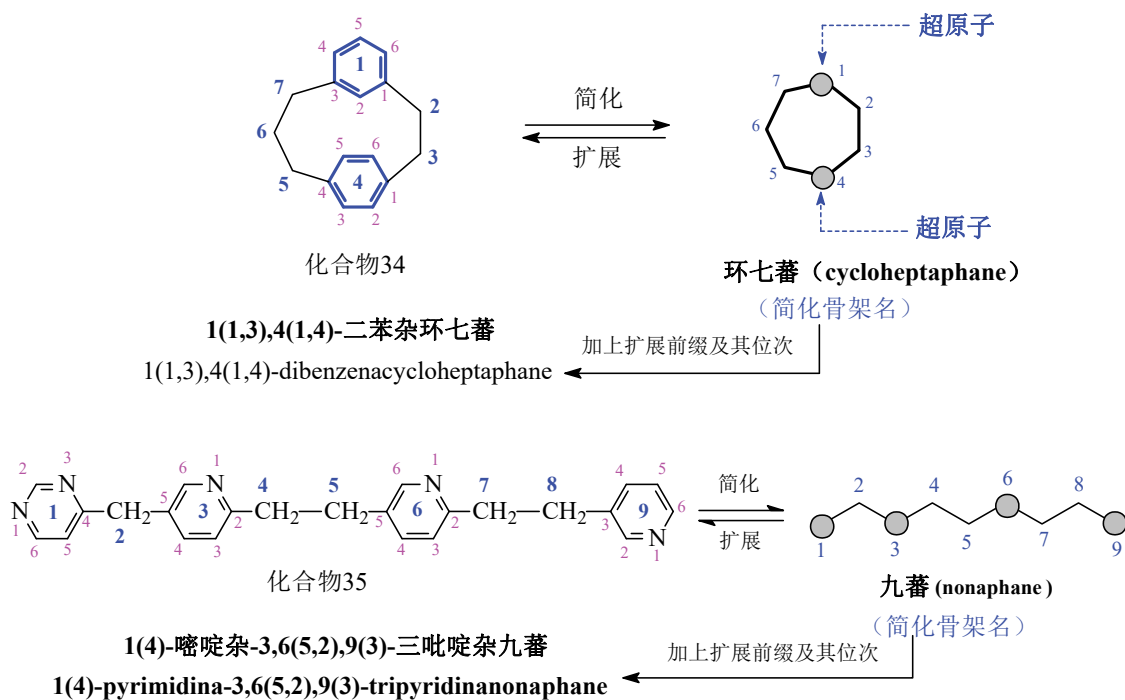


图2 蕃母体氢化物的简化与命名

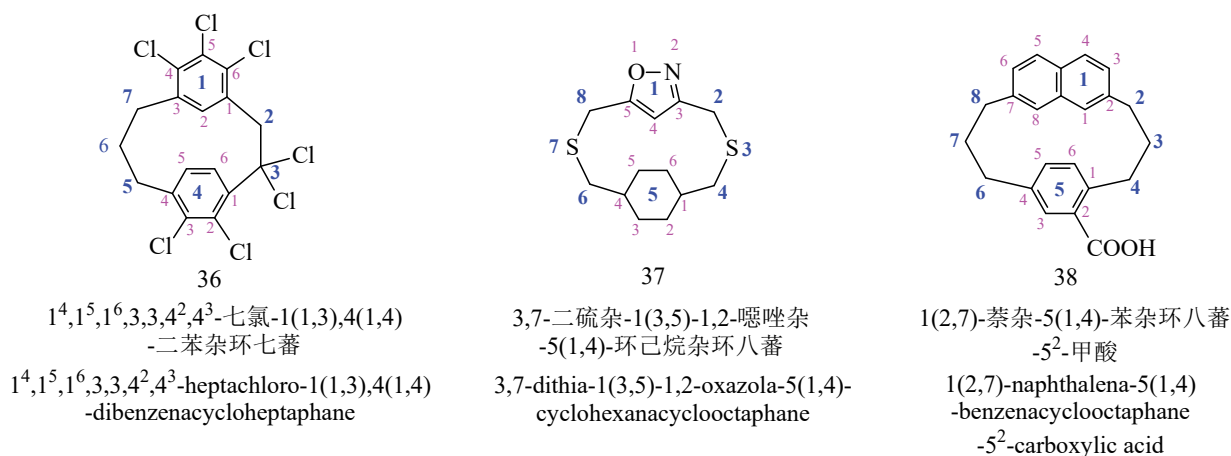


图3 环蕃类化合物的命名举例

通常情况下,基础有机化学的理论课堂不会讲授“蕃”。但是,蕃命名很好地说明了用“母体氢化物”来统一处理有机化合物的命名,可以将那些结构复杂有机化合物的命名简单化、系统化,有利于有机化学的学科发展。即使基础有机化学的教学要求不高,我们仍然应该教导学生以母体氢化物的命名为基础和出发点,用母体氢化物来统一处理有机化合物的命名。

2 特性基团

2.1 特性基团的含义

特性基团是加在母体氢化物上的杂原子或含有杂原子的基团^{[1]22,[6,7,10]}。常见的特性基团如图4所示。其中含有单个不饱和碳原子的特性基团具有一定的特殊性,例如在命名脂肪族羧酸时,是母体氢化物中的末端甲基被羧基取代^{[1]212}。

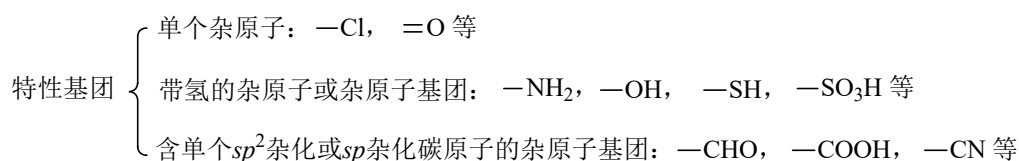


图4 常见特性基团及其分类

特性基团与官能团的含义差别不大,且有机化学界已高度习惯使用“官能团”这一名称,故仍可保留两者同时使用^{[1]22,[5,10]}。但是特性基团不能等同于官能团,二者的含义相似但不相同。特性基团是在命名有机化合物时使用的专门术语,必须含有杂原子;官能团是决定有机化合物性质的原子或基团,不一定含有杂原子^[7,14,18]。

许多原子或基团,如 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{Br}$ 、 $-\text{OH}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CN}$ 等,既是官能团,又是特性基团。但是, $\text{C}=\text{C}$ 和 $\text{C}\equiv\text{C}$ 是官能团而不是特性基团。众所周知, $\text{C}=\text{C}$ 和 $\text{C}\equiv\text{C}$ 分别是烯烃和炔烃的官能团,但在CCS-2017有关特性基团的表4-1和表5-2中并没有烯烃和炔烃在列^{[1]145,146,153,154},说明 $\text{C}=\text{C}$ 和 $\text{C}\equiv\text{C}$ 并不是特性基团而只是官能团,命名时可将其放在母体氢化物中描述它们的结构。图5给出了一些表明 $\text{C}=\text{C}$ 和 $\text{C}\equiv\text{C}$ 不是特性基团的具体实例。

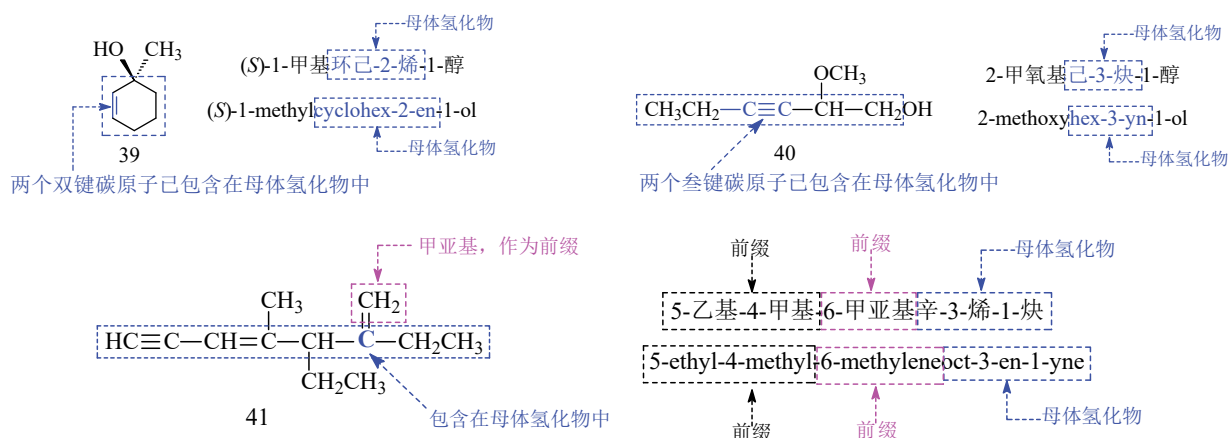


图5 $\text{C}=\text{C}$ 和 $\text{C}\equiv\text{C}$ 不是特性基团举例

特性基团不等于官能团的另一个典型实例是: $\text{O}=(\text{氧亚基})$ 是特性基团但不是官能团, $\text{C}=\text{O}(\text{羰基})$ 是官能团但不是特性基团。在CCS-2017表4-1^{[1]145,146}中,酮(ketone)的结构类别一栏给出的结构式

为 >C=O ，同时还特意在表底注明：带括号的碳原子(C)已包括在母体氢化物的名称中，并不属于前缀或后缀所表达的基团(即前缀或后缀所表达的特性基团都是 $=\text{O}$ ，作前缀时称为“氧亚基”，作后缀时称为“酮”，均不包括羰基碳)。换言之：用取代法命名酮时，虽然以“酮(-one)”作为后缀，但“酮”字的含义并不包含碳，仅指结构中的特性基团“ $=\text{O}$ ”。图6给出了表明 $=\text{O}$ 是特性基团而 C=O 是官能团的具体实例。

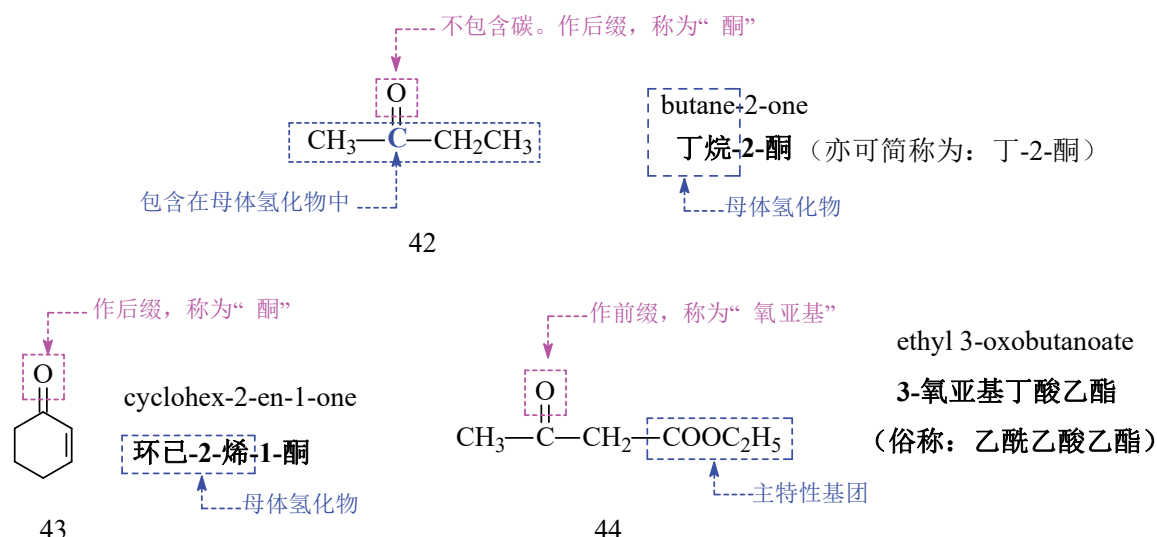


图6 $=\text{O}$ 是特性基团而 C=O 是官能团举例

以上讨论和举例说明：使用“特性基团”代替“官能团”来命名有机化合物，分子中的每个原子只允许被描述一次，避免了重复描述某个原子的情况，因而能够更加准确地命名有机化合物。

“母体氢化物”和“特性基团”是相辅相成的关系。有了母体氢化物的概念，才能理解为什么要把羰基官能团(C=O)拆开，将其中的碳原子放在母体氢化物中描述，而 $=\text{O}$ 作为特性基团来处理；反过来，理解了特性基团不同于官能团之后，才能更好地理解为什么要将 C=C 和 $\text{C}\equiv\text{C}$ 放在母体氢化物中处理。

2.2 常见特性基团用作前缀或后缀时的名称及其优先次序

同一特性基团作为前缀或后缀时的名称并不相同^{[1]145,146}，如表4所示。

命名多官能团化合物时，只能选择一种特性基团作为后缀，此基团称为主特性基团或主体基团^{[1]153}。选择主特性基团要根据CCS-2017表5-2中的次序确定，排在前面的特性基团优先作为主特性基团(即后缀)。表4是根据CCS-2017表4-1^{[1]145,146}和CCS-2017表5-2^{[1]153,154}，结合基础有机化学教学实际，整理出来的常见特性基团用作前缀或后缀时的名称及其优先次序^[7,14,18](按优先递降顺序排列)。

在特性基团优先次序规则中，排在最后面的 $-\text{OR}$ 、 $-\text{SR}$ 、 $-\text{X}$ (卤素)、 $-\text{NO}_2$ 等，只能作为前缀，不能作为后缀。例如“甲氧基苯”“硝基甲烷”“硝基苯”“1-溴丁烷”“1-氯-4-甲基苯”“1-甲基-4-硝基苯”等命名，都是将只能作为前缀的特性基团名称放在母体氢化物名称的前面。对于那些既能作为后缀又能作为前缀的特性基团，则根据被命名化合物的结构和特性基团优先次序规则确定主特性基团。

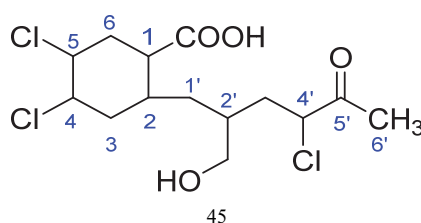
如图7所示，化合物45分子中有四种特性基团，其中 $-\text{Cl}$ 只能作为前缀； $-\text{COOH}$ 、 $=\text{O}$ 、 $-\text{OH}$ 三种可作后缀的特性基团中， $-\text{COOH}$ 在特性基团优先次序规则中排在最前面，故选择 $-\text{COOH}$ 作为主特性基团。其余特性基团均作为前缀，按英文字母顺序排列。

表4 常见特性基团用作前缀或后缀时的名称及其优先次序(按优先递降排列)

化合物类别	特性基团	作前缀时名称	作后缀时名称	帮助记忆“顺口溜”
羧酸	$-\text{COOH}$	羧基	酸; 甲酸*	羧酸、磺酸、酸酐、酯,
磺酸	$-\text{SO}_3\text{H}$	磺酸基	磺酸	酰卤、酰胺、有机腈,
酸酐	$\begin{array}{c} \text{O} \quad \text{O} \\ \parallel \quad \parallel \\ -\text{C}-\text{O}-\text{C}- \end{array}$	—	酸酐	醛基、酮基、醇羟基,
酯	$-\text{COOR}$	(烃)氧(基)羰基	酸(烃)基酯; 甲酸(烃)基酯*	酚、硫、氨基、烷氧基,
酰卤	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ -\text{C}-\text{X} \end{array}$	卤羰基	酰卤; 甲酰卤*	烷基、卤素和硝基
酰胺	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ -\text{C}-\text{NH}_2 \end{array}$	氨基羰基	酰胺; 甲酰胺*	前面的优先作主体,
腈	$-\text{C}\equiv\text{N}$	氰基	腈	排在后面是取代基
醛	$-\text{CHO}$	甲酰基	醛	
酮	$=\text{O}$	氧亚基	酮	
醇	$-\text{OH}$	羟基	醇	
酚	$-\text{OH}$	羟基	酚	
硫醇、硫酚	$-\text{SH}$	巯基	硫醇、硫酚	
胺	$-\text{NH}_2$	氨基	胺	
醚	$-\text{OR}$	烃氧基	—	
硫醚	$-\text{SR}$	烃硫基	—	
卤化物	$-\text{X}$	卤原子的名称	—	
硝基化合物	$-\text{NO}_2$	硝基	—	

*当 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{COOR}$ 、 $-\text{COX}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 等含有单个不饱和碳原子的特性基团连在环状母体氢化物或杂原子上时,

作后缀时的名称为: 甲酸、甲酸(烃)基酯、甲酰卤、甲酰胺



45

4,5-二氯-2-(4-氯-2-(羟甲基)-5-氧亚己基)环己烷-1-甲酸

4,5-dichloro-2-(4-chloro-2-(hydroxymethyl)-5-oxohexyl)cyclohexane-1-carboxylic acid

图7 确定主特性基团举例

3 确定母体氢化物的原则及思考顺序

主特性基团被确定之后,则需要根据被命名化合物的具体结构确定用作词根的母体氢化物。表5列举了一些命名具体化合物时如何确定主特性基团和母体氢化物的实例。

(1) 命名无环化合物时^{[1]154-158}, 首先要根据特性基团优先次序规则和该化合物的结构, 确定作为后缀的主特性基团。主特性基团确定后, 按照下列顺序逐条对照(“>”表示“优于”), 依次思考, 直到确定母体氢化物: 包含主特性基团个数最多的链>最长的链>汇集重键数量最多的链>汇集双键数量最多的链>作为后缀的主特性基团位次或位次组最低的链>前缀中取代基数目最多的链>所有取代基的数字位次组最低的链>按照英文字母顺序排列在前面的前缀或取代基的链。具体实例参见表5中化合物46-56。

表5 确定主特性基团及母体氢化物举例

序号	待命名化合物	CCS-2017中文命名及英文命名	解释或说明
46		2,2,5,5-四甲基-3,4-二甲亚基己烷 2,2,5,5-tetramethyl-3,4-dimethylenhexane	分子中没有特性基团, 直接选择最长碳链作为母体氢化物
47		5-丁基壬-2-烯-7-炔 5-butylnon-2-en-7-yne	两条链长度相同, 选择包含重键个数最多链作为母体氢化物
48		5-(丁-1-炔-1-基)壬-2,7-二烯 5-(but-1-yn-1-yl)nona-2,7-diene	两条链长度相同, 重键个数也相同, 选择包含两个双键的链作为母体氢化物(不能选择含有一个双键和一个叁键的链)
49		2-羟基丙烷-1,2,3-三甲酸 2-hydroxypropane-1,2,3-tricarboxylic acid (俗名: 柠檬酸)	—COOH 优于 —OH, —COOH 是主特性基团; 选择后缀中主特性基团数目最多的母体氢化物 不能命名为: 2-羧基-2-羟基戊二酸 ^{[12]13} , 因为这个命名的后缀中只有两个 —COOH
50		2-烯丙基丙二酸; 2-(丙-2-烯-1-基)丙二酸 2-allylmalonic acid ; 2-(prop-2-en-1-yl)malonic acid	—COOH 是主特性基团; 选择包含主特性基团最多的链为母体氢化物; CH ₂ =CHCH ₂ — 俗称烯丙基(allyl), 也可用丙-2-烯-1-基(prop-2-en-1-yl)描述其结构
51		2-(氯羰基)戊-4-烯酸 2-(chlorocarbonyl)pent-4-enoic acid	—COOH 优于 —COCl, —COOH 是主特性基团; 选择包含主特性基团的最长碳链为母体氢化物
52		3-乙酰基-6-氧亚基庚醛 3-acetyl-6-oxoheptanal 3-(1-氧亚基乙-1-基)-6-氧亚基庚醛 3-(1-oxoethyl-1-yl)-6-oxoheptanal	—CHO 优于 =O, —CHO 是主特性基团; 选择包含主特性基团的最长的链为母体氢化物; CH ₃ CO— 俗称乙酰基(acetyl), 也可用 1-氧亚基乙-1-基(1-oxoethyl-1-yl)描述其结构
53		8-氯-5-(3-羟丙基)辛烷-1,7-二醇 8-chloro-5-(3-hydroxypropyl)octane-1,7-diol	—OH 是主特性基团; 选择主特性基团位次组最低的链(1,7-二醇的位次小于 1,8-二醇)为母体氢化物
54		3-氯-2-甲基-3-氧亚基丙酸乙酯 ethyl 3-chloro-2-methyl-3-oxopropanoate	—COOC ₂ H ₅ 优于 =O, —COOC ₂ H ₅ 是主特性基团; 选前缀中取代基最多的最长碳链为母体氢化物
55		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	—OH 是主特性基团; 选择所有前缀中取代基位次组最低的链(2,5,6-的位次组小于 2,5,7-)为母体氢化物
56		4-溴-2-(2-氯乙基)丁烷-1-醇 4-bromo-2-(2-chloroethyl)butan-1-ol	—OH 是主特性基团; 具有两条长度相同、取代情况亦相同的链, 选择英文字母排在前面的链作为母体氢化物
57		3-(3-(羧甲基)萘-2-基)丙酸 3-(3-(carboxymethyl)naphthalen-2-yl)propanoic acid	—COOH 是主特性基团; 选链, 选包含主特性基团的最长碳链为母体氢化物

(待续)

(续表5)

序号	待命名化合物	CCS-2017中文命名及英文命名	解释或说明
58		4,5-二氯-2-(5-氯-3-(羟甲基)-6-氧亚壬基)环己烷-1-甲酸 4,5-dichloro-2-(5-chloro-3-(hydroxymethyl)-6-oxononyl)cyclohexane-1-carboxylic acid	—COOH是主特性基团，连在环上，选环作为母体氢化物。其余作为前缀，按英文字母顺序排列
59		4-(2-羟乙基)-3-(羟甲基)-2-亚甲基环戊-1-醇 4-(2-hydroxyethyl)-3-(hydroxymethyl)-2-methylenecyclopentan-1-ol	—OH是主特性基团；环上和链上都只有一个—OH直接与其相连，但环上取代基更多，选择环作为母体氢化物
60		(1R,4R)-二环[2.2.1]庚-5-烯-2-酮 (1R,4R)-bicyclo[2.2.1]hept-5-en-2-one	=O是主特性基团；母体氢化物是桥环烃。编号时首先要遵循桥环化合物的命名规则，从桥头碳开始编号，使其编号最小；其次要使主特性基团的编号尽量小
61		4-甲氧基-N-苯基苯胺 4-methoxy-N-phenylaniline	—NH ₂ 是主特性基团；要选择取代基更多的aniline为母体结构

(2) 命名环-链化合物时^{[1]159-160}，仍然要首先确定主特性基团，选择带有最多主特性基团个数的环或链作为母体氢化物，且不论环的大小和链的长短；当分子中含有多个主特性基团数目相同的链或环供选择时，则需要比较它们的取代程度来确定母体氢化物。具体实例参见表5中化合物57-59。

(3) 命名环系化合物时^{[1]158-159}，依然要首先确定主特性基团，然后按照命名环系化合物的有关规则确定母体氢化物。具体实例请参见表5中化合物60、61。

4 结语

(1) “母体氢化物”和“特性基团”都是仅用于有机化合物命名的术语，将它们用来处理命名并不改变有机化学中的其他内容^{[1]前言}，亦不改变“官能团”的含义。例如，C=C和C≡C仍然是决定烯烃和炔烃主要化学性质的官能团；对有机化合物进行分类时，仍然要按照官能团分类而不是按照特性基团分类。

(2) 用“母体氢化物”和“特性基团”来处理有机化合物的命名，不仅有利于国际交流，有利于系统、精准、方便地命名有机化合物，更有利于有机化学学科的发展。虽然这种处理方法不符合我们长期执行CCS-1980所形成的按照官能团命名的习惯，但是我们要以学生为中心，与时俱进，努力克服思维惯性，尽快接受和适应CCS-2017。我校自2018年秋季开始采用和实施命名新规则，根据教学情况反馈，学生普遍认为命名新规则系统性更强，更容易理解和接受，这可能与学生只是在高中有机化学中简短地学习过命名，没有形成根深蒂固、深入骨髓的思维惯性有关。

参 考 文 献

- [1] 中国化学会. 有机化合物命名原则2017. 北京: 科学出版社, 2018.
- [2] 黄根平, 赵温涛. 化学教育(中英文), 2019, 41 (24), 20.
- [3] 马宁, 王光伟, 张文勤. 大学化学, 2019, 34 (9), 116.
- [4] 陆语欣, 丁小勤, 赵蓓. 化学教与学, 2019, No. 4, 60.
- [5] 王丽娟, 刘芸, 靳菊情, 李洋, 许昭, 唐玉海, 徐四龙. 大学化学, 2022, 37 (7), 2109069.
- [6] 石先莹, 王晔峰, 张琦, 王超. 化学教育(中英文), 2021, 42 (22), 29.
- [7] 沈越, 李小微. 大学化学, 2020, 35 (7), 130.

-
- [8] 孙贺平, 吴毓林. 有机化学, **2015**, 35 (5), 1179.
- [9] 罗千福, 王朝霞. 高等理科教育, **2020**, 150 (2), 101.
- [10] 罗千福, 王朝霞. 化学教育(中英文), **2019**, 40 (10), 19.
- [11] 田霞, 韩建荣, 甄小丽, 苏伟. 大学化学, **2022**, 37 (3), 2106027.
- [12] 王朝霞, 罗千福. 化学教学, **2019**, No. 4, 89.
- [13] 王朝霞, 罗千福, 窦清玉, 胡习乐. 化学教育(中英文), **2018**, 39 (22), 16.
- [14] 李小瑞, 沈越. 有机化学学习与考研辅导. 第3版. 北京: 化学工业出版社, 2020.
- [15] 王彦广, 吕萍, 傅春玲, 马宁. 有机化学. 第4版. 北京: 化学工业出版社, 2020.
- [16] 冯骏材, 郑文华, 王少钟. 有机化学. 第2版. 北京: 科学出版社, 2019.
- [17] 天津大学有机化学教研室, 赵温涛, 王伟光, 张文勤. 有机化学. 第6版. 北京: 高等教育出版社, 2019.
- [18] 李小瑞, 姚团利, 赵艳娜, 张金. 有机化学. 第2版. 北京: 化学工业出版社, 2018.
- [19] 中国化学会. 有机化学命名原则1980. 北京: 科学出版社, 1983.