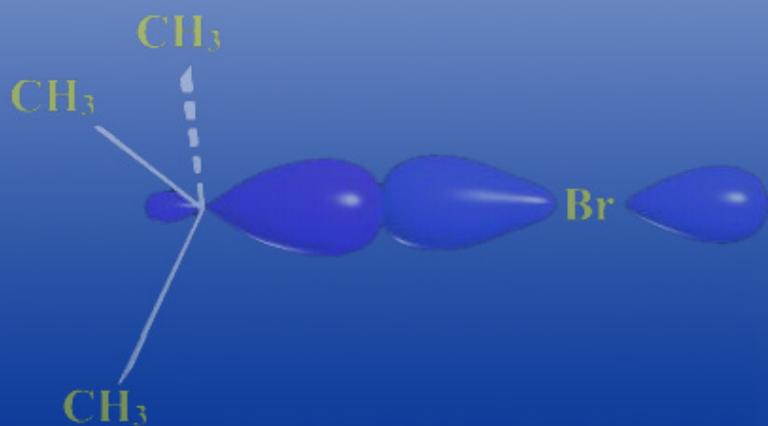


第一章

绪论 有机化合物的命名



本章提纲

第一节 有机化学的产生和发展

第二节 有机化学中的同分异构现象

第三节 有机化合物的分类

第四节 有机化合物结构式的表达方式

第五节 有机化合物的命名



第一节 有机化学的产生和发展

一、从有机体内提取有机物

(1773 –1805)

二、由提取进入到提取合成并举的时代

(1806 –1828 –1848)

三、进入合成时代

(1849 –1900 –2001)



学科建设

- (1) 制备了几千万种有机化合物（1990年，1000万种）。
- (2) 建立了一套系统鉴定和测定有机化合物的方法。
- (3) 逐步建立和完善了有机化学的理论。

学术成就

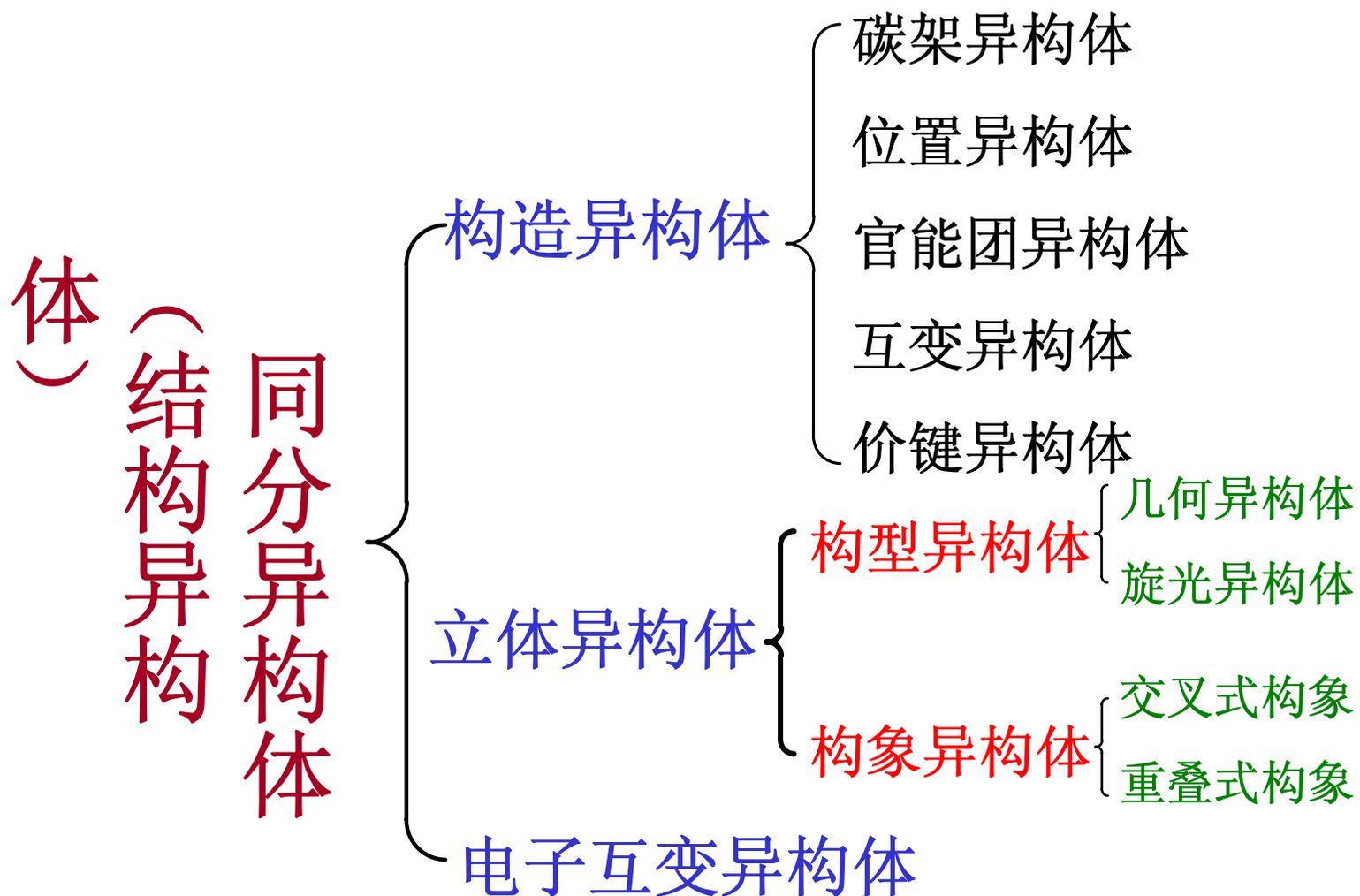
诺贝尔化学奖（1901-2002，92届，70届与有机化学有关）。

二十世纪（46项重大发明，8项与有机化学有关）。

研究思路

深入、巧妙、与其它学科广泛交叉渗透（也渗透到人类活动各方面）。

第二节 有机化学中的同分异构现象



* 分子式相同, 结构不同的化合物称为同分异构体, 也叫结构异构体



构造异构体：因分子中原子的连结次序不同或者键合性质不同而引起的异构

碳架异构体：因碳架不同而引起的异构体；如：



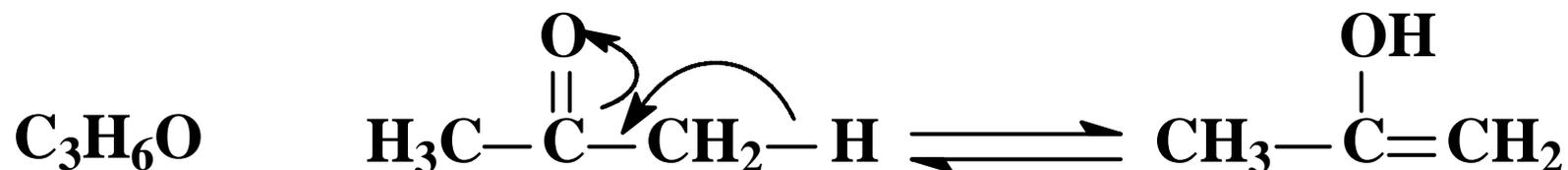
位置异构体：由于官能团在碳链或碳环上的位置不同而产生的异构体；如：



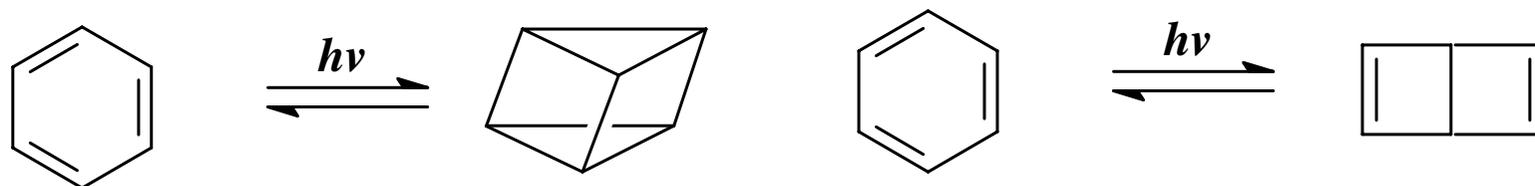
官能团异构体：由于分子中官能团不同而产生的异构体；如：



互变异构体: 因分子中某一原子在两个位置迅速移动而产生的官能团异构体

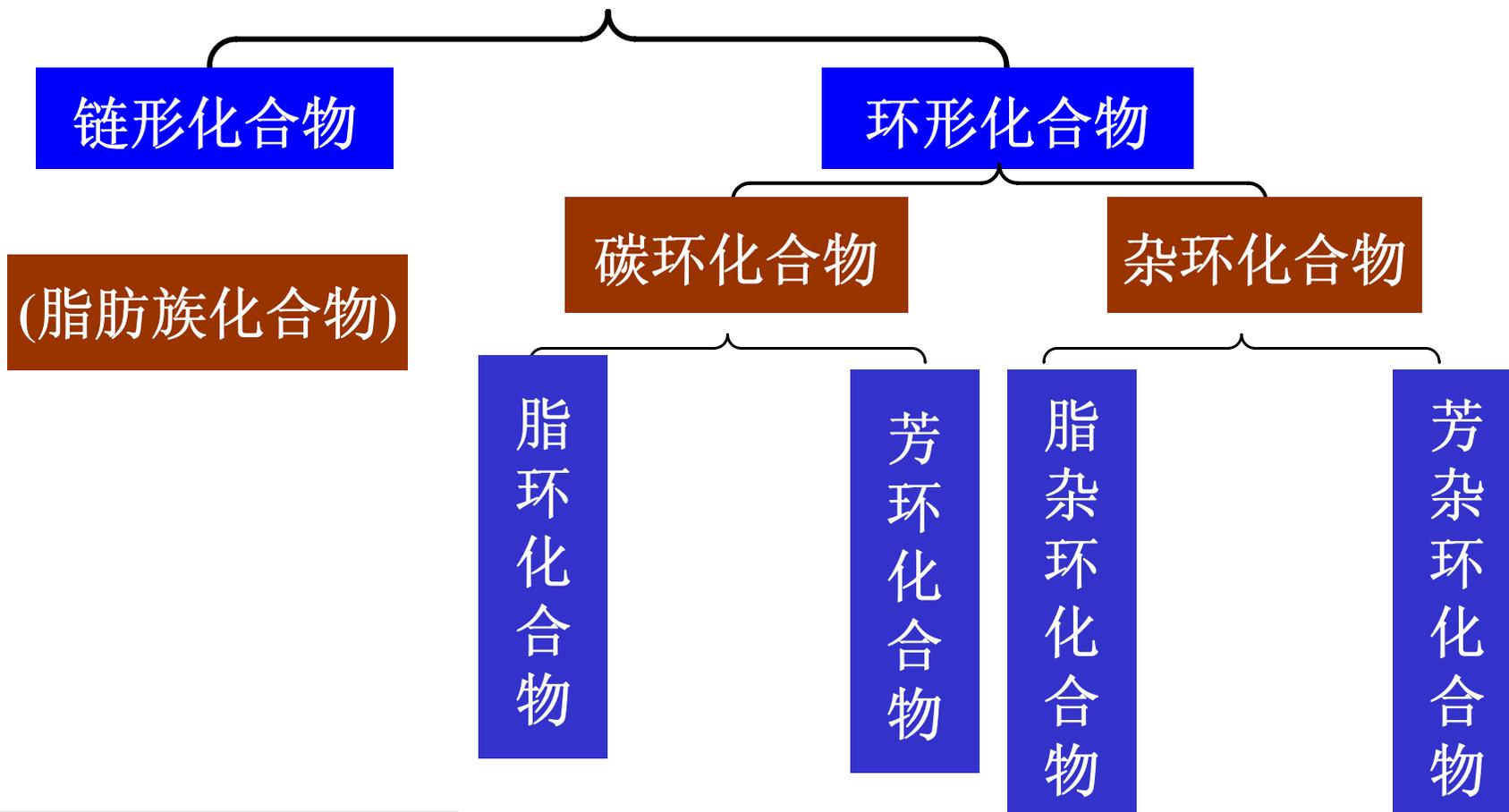


价键异构体: 因分子中某些价键的分布发生了改变, 与此同时也改变了分子的几何形状, 从而引起的异构体; 如:



第三节 有机化合物的分类

一 按碳架分类

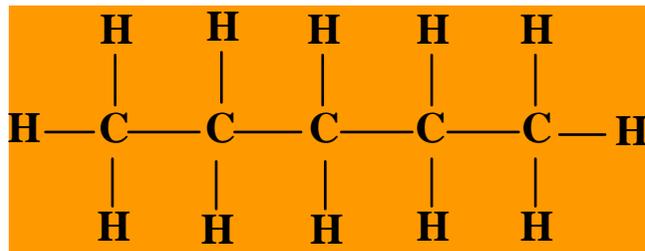


二 按官能团分类

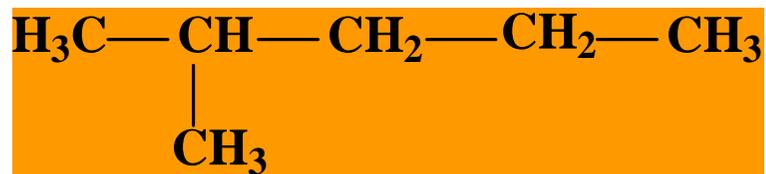


第四节 有机化合物构造式的表达方式

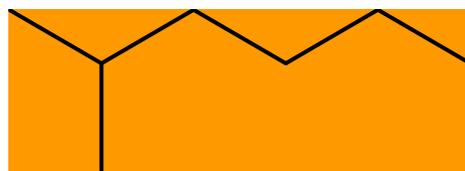
蛛网式



结构简式



键线式



第五节 有机化合物的命名

- 一 链烷烃的命名
- 二 单环烷烃的命名
- 三 桥环烷烃的命名
- 四 螺环烷烃的命名
- 五 单官能团化合物的系统命名
- 六 多官能团化合物的系统命名



一 链烷烃的命名

1. 系统命名法: **IUPAC**
CCS (China Chemical Society)
CA

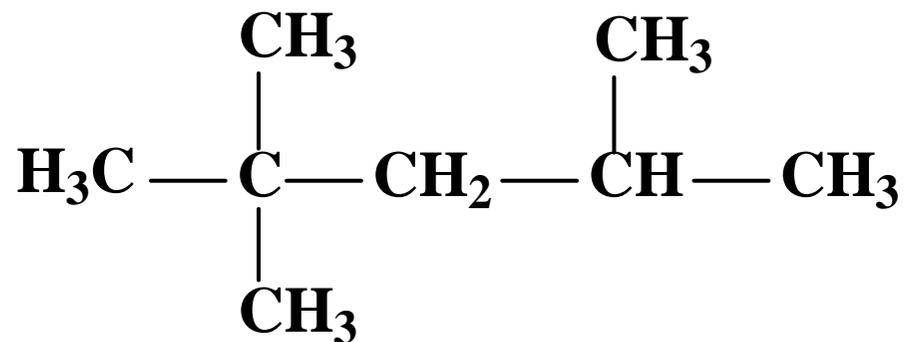
(1) 直链烷烃的命名:

含**10**个碳原子以内的直链烷烃, 从**1-10**依次用天干名称甲、乙、丙、丁、戊、己、庚、辛、壬、癸加上烷来命名; 而含碳原子**10**个以上的直链烷烃, 用数目加上烷来命名。



(2) 支链烷烃的命名

*1 碳原子的级

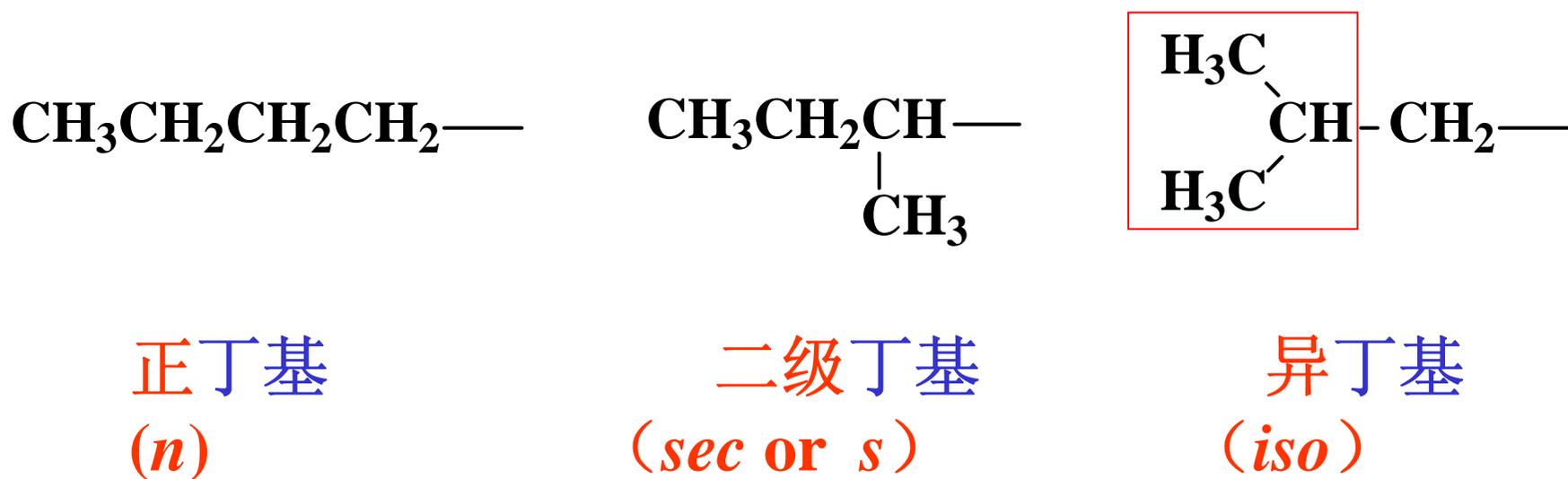
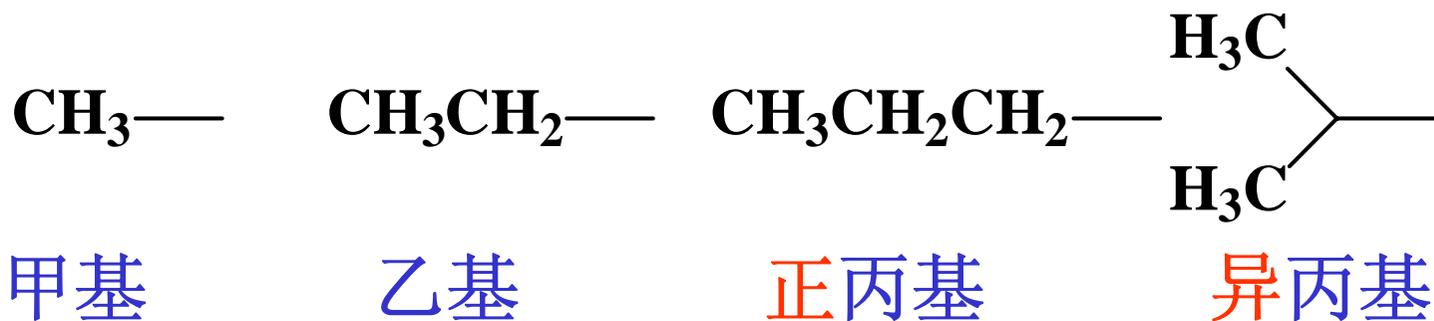


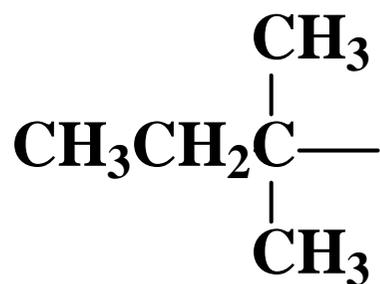
| | | | |
|-----|-----|-----|-----|
| 1°H | 2°H | 3°H | |
| 1°C | 2°C | 3°C | 4°C |
| (伯) | (仲) | (叔) | (季) |

与一个碳原子相连的碳为一级碳原子；
与二个碳原子相连的碳为二级碳原子；
与三个碳原子相连的碳为三级碳原子；
与四个碳原子相连的碳为四级碳原子。

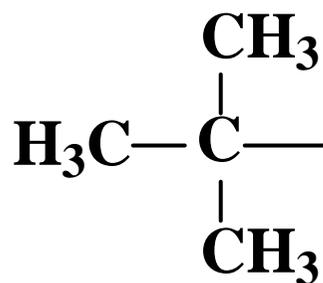


*2 烷基的命名:

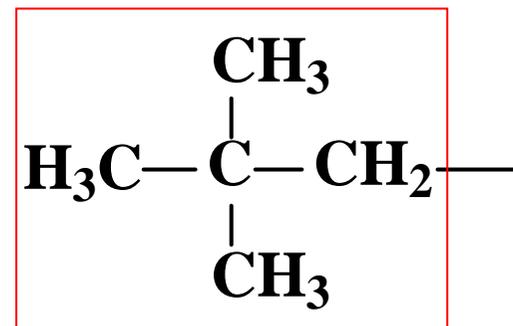




三级戊基
(*Tert or t*)



三级丁基



新戊基
(*neo*)



*3 顺序规则

各种原子或取代基按先后次序排列的规则称为顺序规则。

第一条规则：

将各种取代基的连接原子，按原子序数的大小排列，原子序数大的顺序在前。若为同位素，则质量数高的顺序在前。



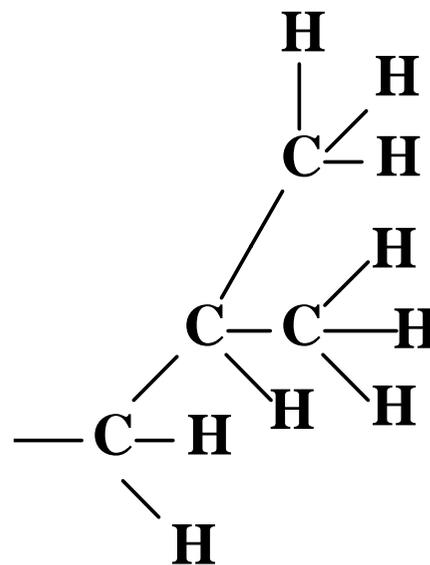
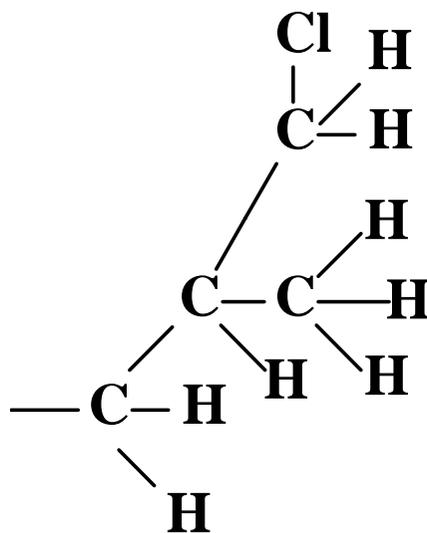
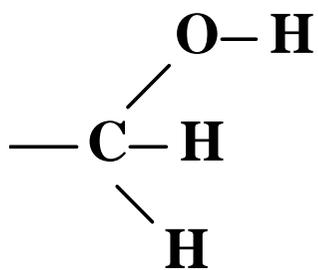
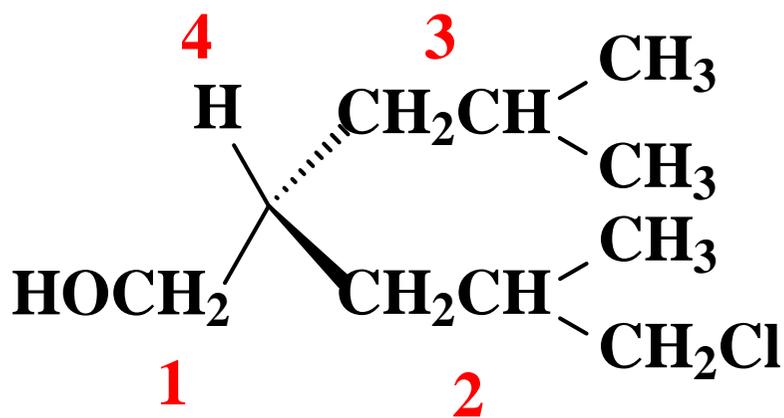
不同原子按原子序数排列

同位素按质量数由高到低的顺序排列



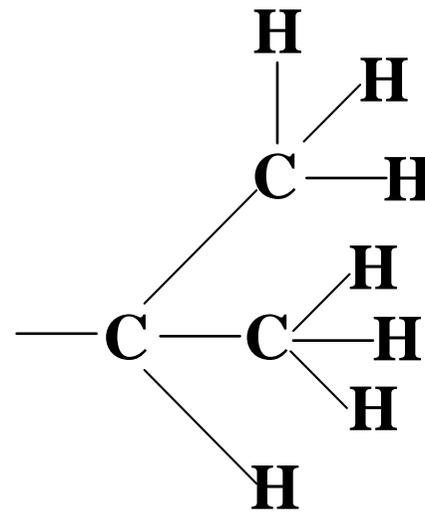
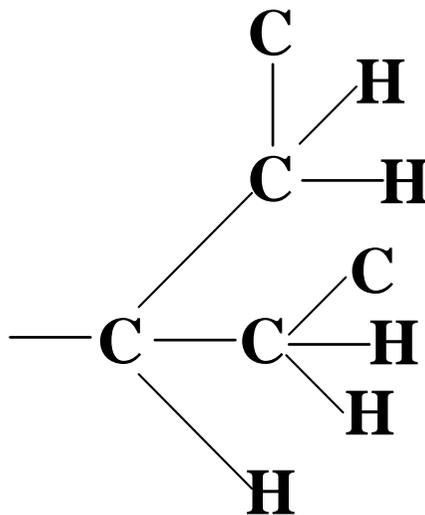
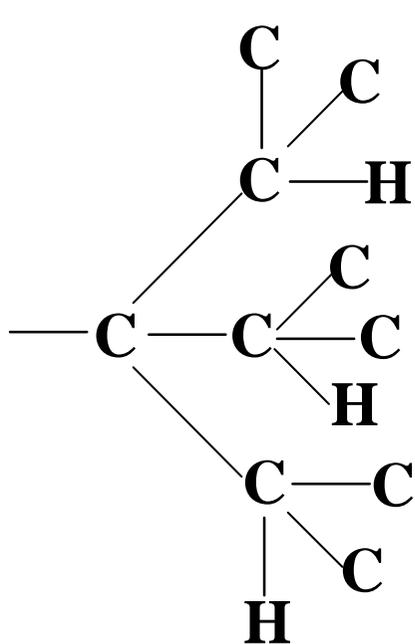
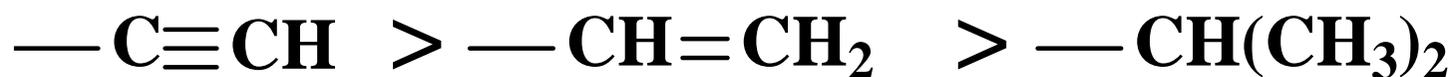
第二条规则

若多原子基团的第一个连接原子相同，则比较与它相连的其它原子，先比较原子序数最大的原子，再比较第二大的，依次类推。若第二层次的原子仍相同，则沿取代链依次相比，直至比出大小为止。



第三条规则

含不饱和键时排列顺序大小的规则：连有双键或叁键的原子可以认为连有两个或三个相同的原子。



*4 有机化合物系统命名的基本格式

构型 + 取代基 + 母体

R, S; D, L; Z,
E; 顺, 反

取代基位置号 + 个数 + 名称
(有多个取代基时, 中文按顺序规则确定次序, 小的在前。
英文按英文字母顺序排列)

官能团位置号
+ 名称
(没有官能团时
不涉及位置号)

iso, neo 参加比较

i (异), *n-* (正), *sec* (二级), *tert* (三级), *cis* (顺),
trans (反), **di** (二个), **tri** (三个), **tetra** (四个) 不参加比较。



*5 命名步骤

(A) 确定主链:

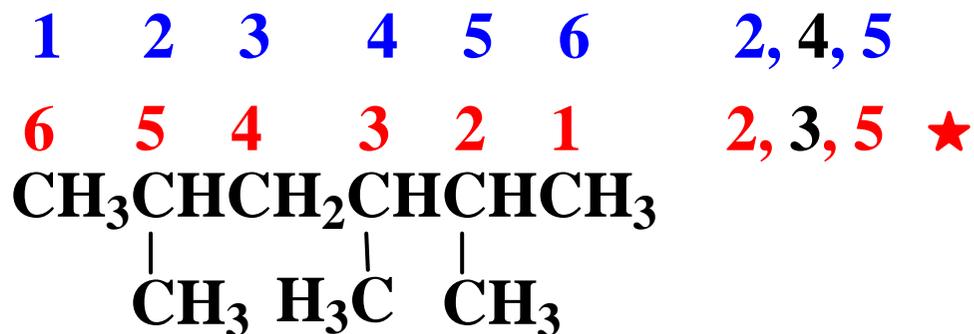
链的长短（长的优先），侧链数目（多的优先），侧链位次大小（小的优先），各侧链碳原子数（多的优先），侧分支的多少（少的优先）。

(B) 编号：按最低系列原则编号。

最低系列原则：使取代基的位置号码尽可能小。若有多个取代基，逐个比较，直至比出高低为止。

(C) 按名称基本格式写出全名。

实例一



1 确定主链：最长链为主链。

2 编号：第一行取代基编号为2, 4, 5;

第二行取代基编号为2, 3, 5;

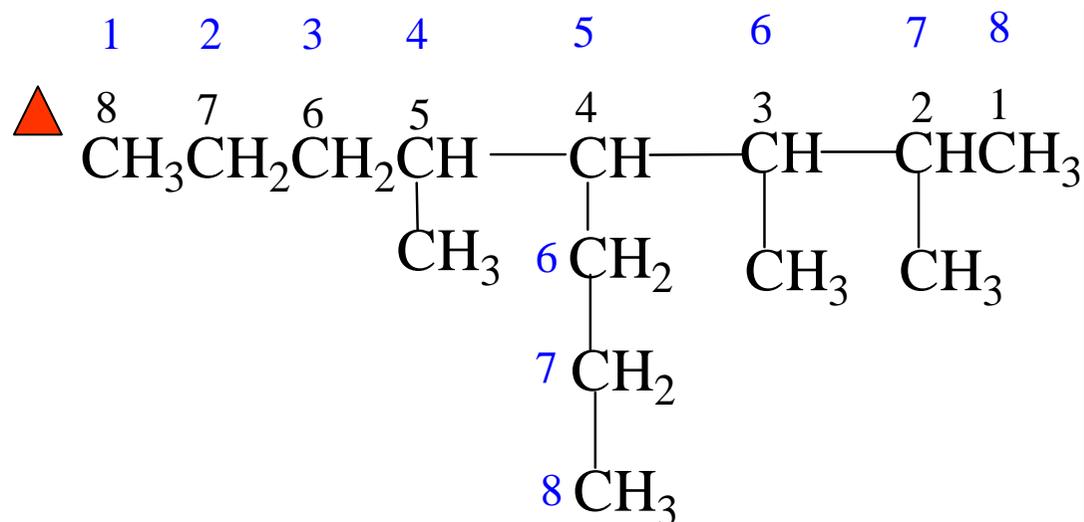
根据最低系列原则, 用第二行编号。

3. 命名：中文名称：2,3,5-三甲基己烷

英文名称：2,3,5-trimethylhexane



实例二



1 确定主链： 有两个等长的最长链。

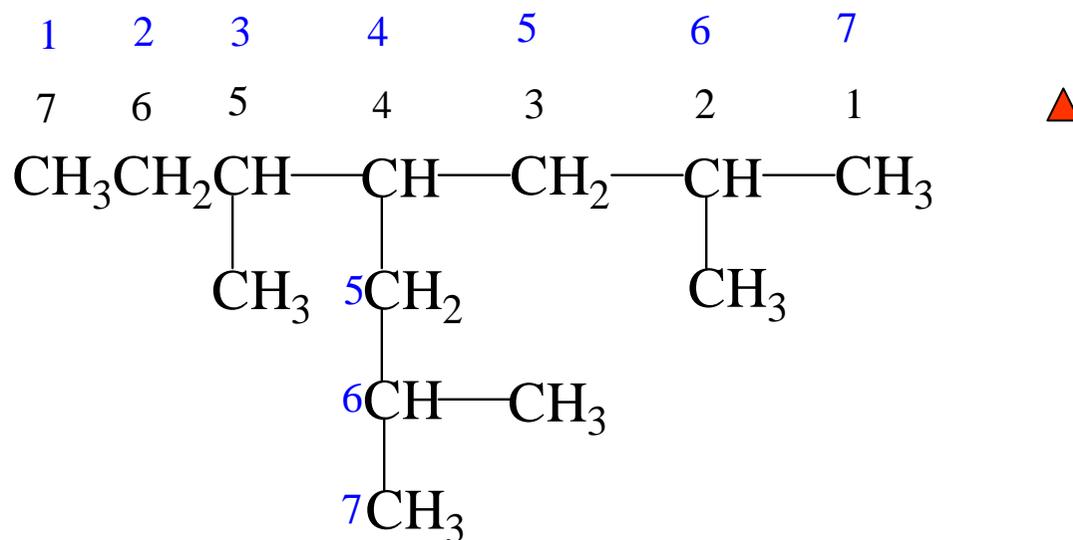
比侧链数： 一长链有四个侧链，另一长链有二个侧链，多的优先。

2 编号： 第二行取代基编号**2,3,4,5**；第一行取代基编号**4,5,6,7**。根据最低系列原则，选第二行编号

3 命名： 中文名称：**2,3,5-三甲基-4-丙基辛烷**

英文名称：**2,3,5-trimethyl-4-*n*-propyloctane**

实例三



1 确定主链：有两根等长的主链，侧链数均为三个。

一长链侧链位次为2,4,5；而另一长链侧链位次为2,4,6，小的优先。

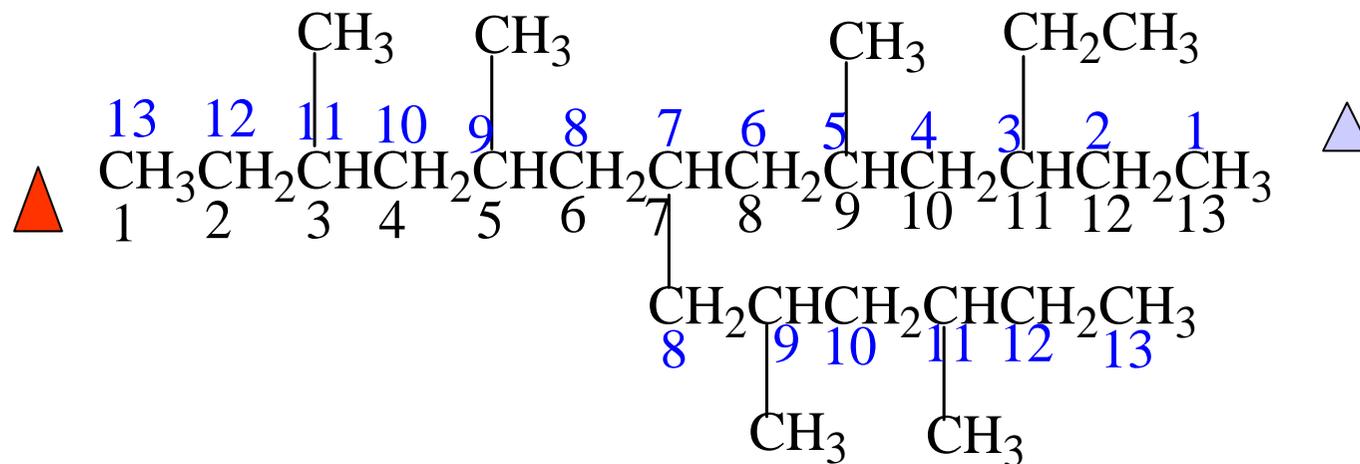
2 编号：黑色编号侧链位次2,4,5；蓝色编号侧链位次3,4,6。按最底系列原则选黑色编号。

3 命名：中文命名：2,5-二甲基-4-异丁基庚烷；或 2,5-二甲基-4-(2-甲丙基)庚烷
英文命名：4-isobutyl-2,5-dimethylheptane；或

2,5-dimethyl-4-(2-methylpropyl)heptane



实例四



1 确定主链： 有两根等长的最长链。侧链数均为5。侧链的位次均为3, 5, 7, 9, 11。

侧链的碳原子数由小到大依次为：1, 1, 1, 2, 8 多的优先

1, 1, 1, 1, 9

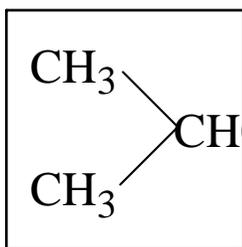
2 编号： 第二行编号和第一行编号取代基位次等同(均为3,5,7,9,11)，此时用最底系列原则无法确定选那一种编号，则用下面方法确定编号。中文，让顺序规则中顺序较小的基团位次尽可能小，所以，取第二行字编号。英文，按英文字母顺序，让字母排在前面的基团位次尽可能小，所以取第一行编号。

3 命名： 中文 3,5,9-三甲基-11-乙基-7-(2,4-二甲基己基)十三烷

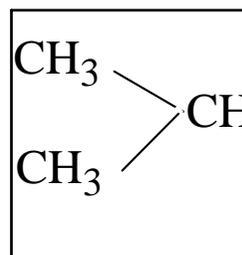
英文 7-(2,4-dimethylhexyl)-3-ethyl-5,9,11-trimethyltridecane



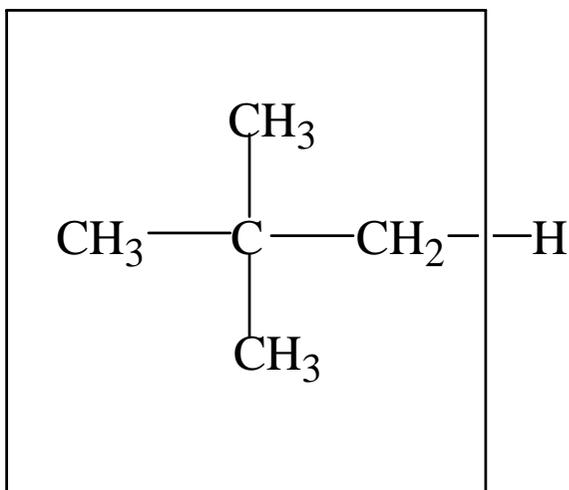
2. 习惯命名法（也称普通命名法）



（异丁烷）



（异戊烷）

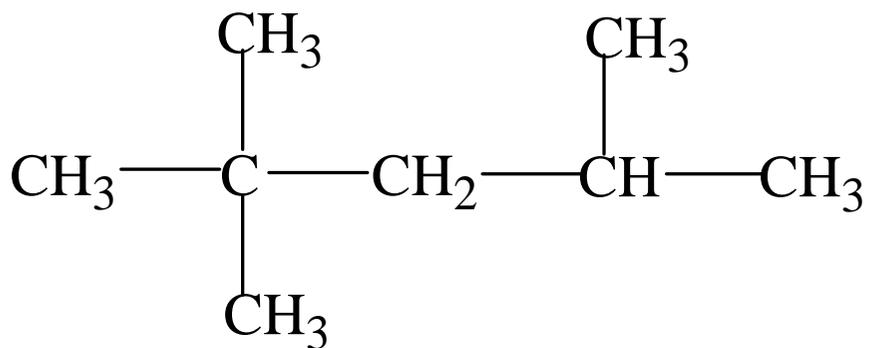


（新戊烷）

习惯命名法命名直链烷烃时，与系统命名法相同。

习惯命名法命名有支链的烷烃时，一般只适合于简单的烷烃。

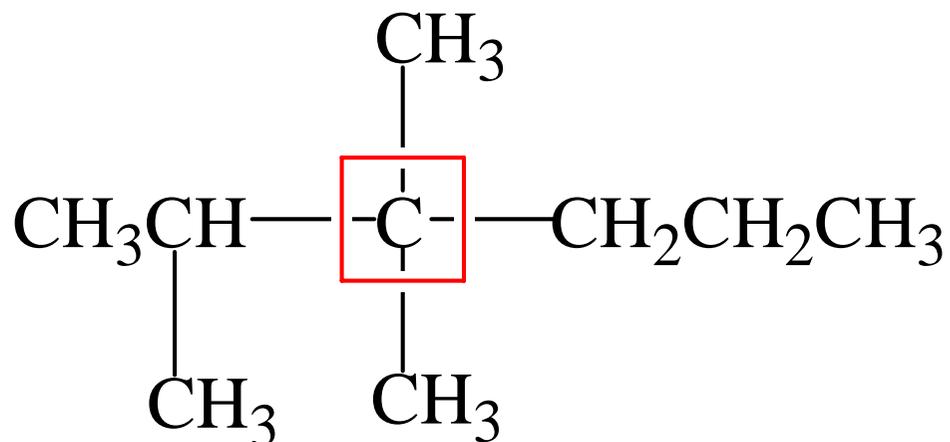




异辛烷

异辛烷中的异不符合命名的规定，是一个特例。

3. 衍生物命名法



二甲基，正丙基，异丙基甲烷

以甲烷为母体，其它部分都作为取代基来命名。(一般总是选连有烷基最多的碳原子作为甲烷的碳原子)

4 俗名 (通常根据来源命名)

甲烷又称沼气

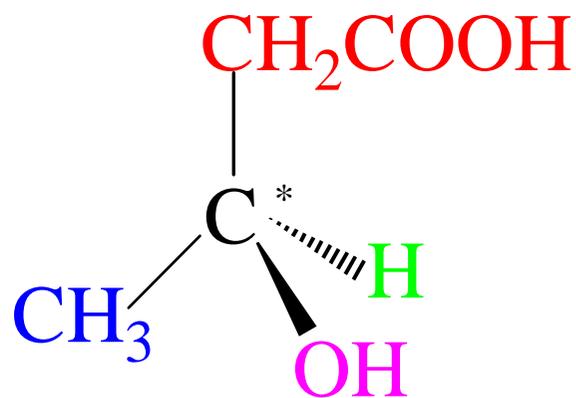
二 单环烷烃的命名

1 手性、手性中心、手性碳原子

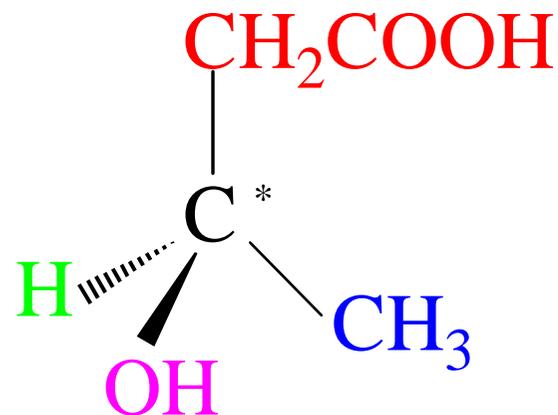
手性：互为镜影、但不能重叠的性质称为手性。

手性中心：如果分子的手性是由于原子或原子团围绕某一点的非对称排列而产生的，这个点就是手性中心。

手性碳原子：与四个不相同的基团相连的碳原子称为不对称碳原子或称手性碳原子。手性碳原子常用*标注。

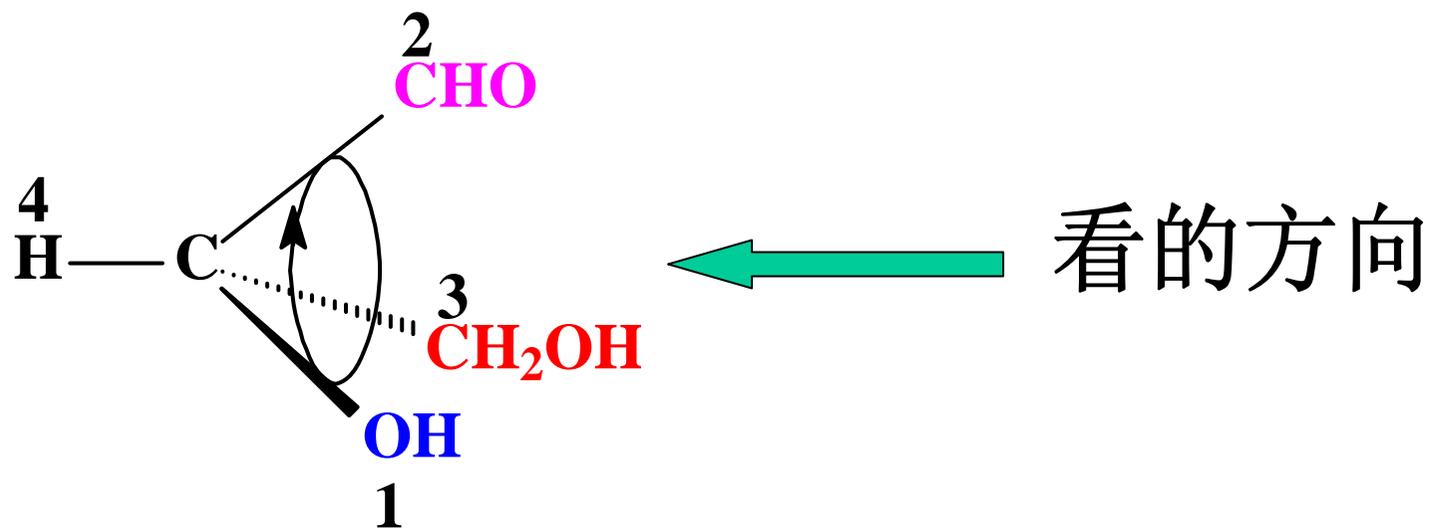


(S)-3-羟基丁酸

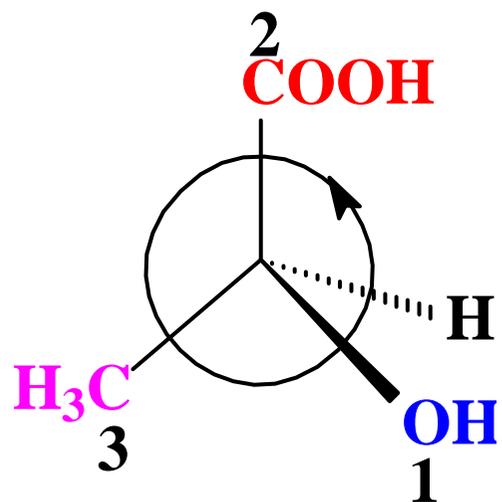


(R)-3-羟基丁酸

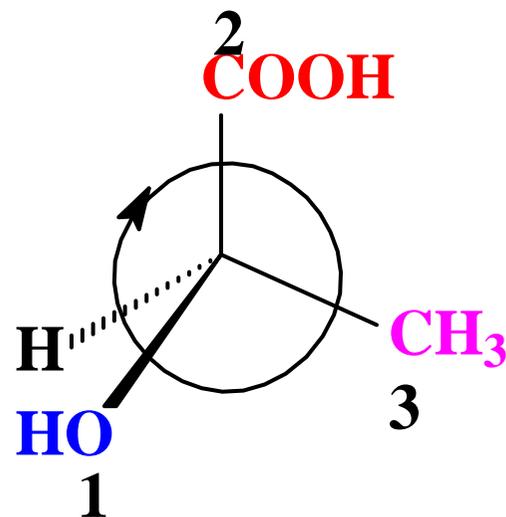
2 *R, S*构型的确定



将与手性碳原子相连的四个基团按顺序规则排列大小，将最小的基团放在离眼睛最远的地方，其它三个基团按由大到小的方向旋转，旋转方向是顺时针的，手性碳为*R*构型；旋转方向是逆时针的，手性碳为*S*构型。



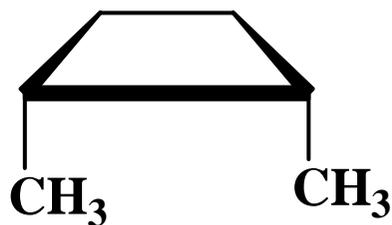
(*S*)-(+)-乳酸;
 逆时针方向运转
 (*sinister*, 拉丁文)



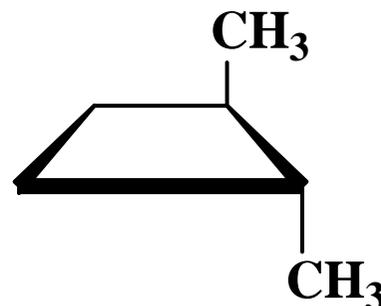
(*R*)-(-)-乳酸;
 顺时针方向运转
 (*rectus*, 拉丁文)

3 Z、E 和顺反构型的确定

由于成环碳原子的单键不能自由旋转而引起的顺反异构体用顺反表示。确定顺反的原则是：二个基团在平面的同一侧为顺，在平面的二侧为反。



顺-1,2-二甲基环丁烷



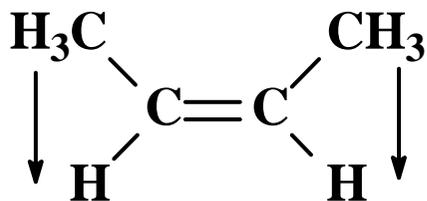
反-1,2-二甲基环丁烷

环用
顺、反
或*R*、*S*
表示构
型

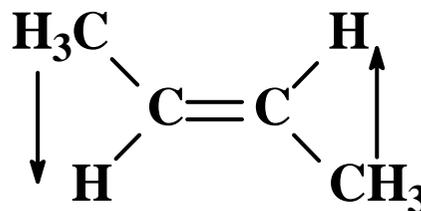
*确切的命名是：

(1*R*,2*R*)-1,2-二甲基环丁烷

由于双键不能自由旋转而引起的顺反异构体用Z, E表示。确定Z, E的原则是：按顺序规则确定与双键碳原子相连二个基团的大小，由大到小用箭头标出。二个双键碳原子连的基团箭头方向一致，双键为Z构型；箭头方向相反，双键为E构型。



(Z)-2-丁烯或顺-2-丁烯



(E)-2-丁烯或反-2-丁烯

双键用Z、E表示构型



4 立体异构体的定义



立体异构体：分子中原子或原子团互相连接次序相同，但空间排列方式不同而引起的异构体。

几何异构体：由于双键不能自由旋转或由于成环碳原子的单键不能自由旋转而引起的立体异构体。

旋光异构体：因分子含有不对称碳原子或者没有对称因素而引起的具有不同旋光性能的立体异构体。

5 单环烷烃的命名

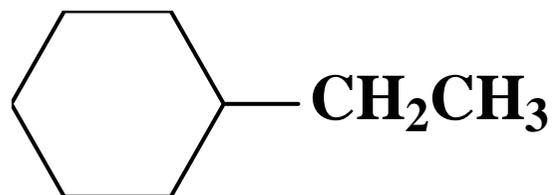
定义：只有一个环的烷烃称为单环烷烃。

命名步骤

- (1) 确定母体：没有取代基的环烷烃本身就是母体，命名时只须在相应的烷烃前加“环”(英文加cyclo)，环上有取代基的环烷烃以环为母体还是以链为母体视情况而定。
- (2) 编号要符合最低系列原则
- (3) 确定构型 带有两个或两个以上取代基时，分子有对称性。
构型用顺反表示，分子没有对称性，构型用*R*、*S*表示。
- (4) 按名称的基本格式要求写出全名

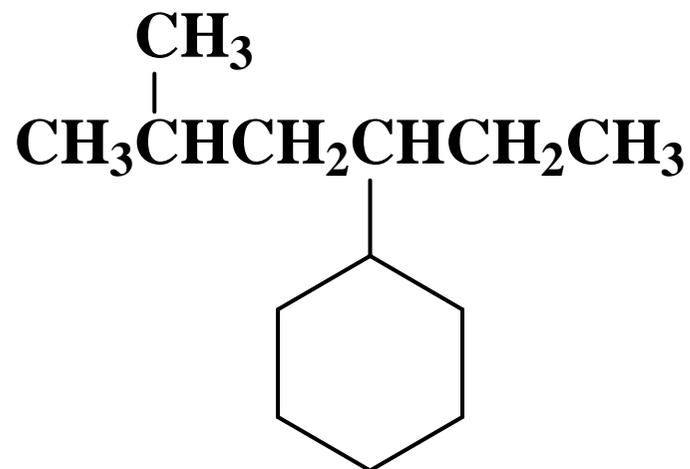


实例六



乙基环己烷

ethylcyclohexane

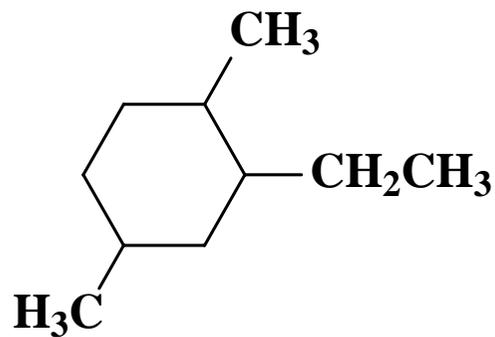


2-甲基-4-环己基己烷

4-cyclohexyl-2-methylhexane

侧链比较简单, 以环为母体, 链为取代基,
侧链比较复杂, 以链为母体, 环为取代基。

实例七

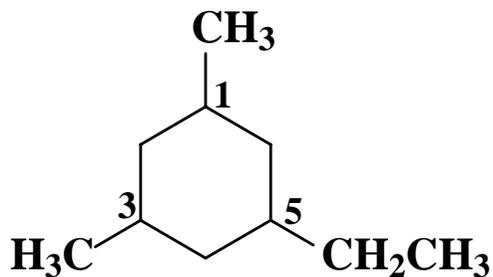


1,4-二甲基-2-乙基环己烷

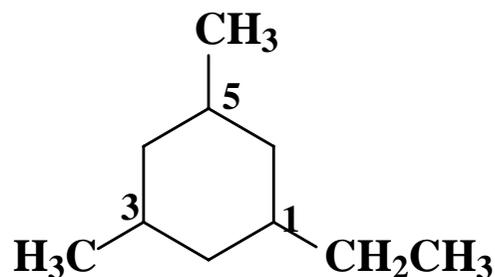
2-ethyl -1,4-dimethylcyclohexane



实例八



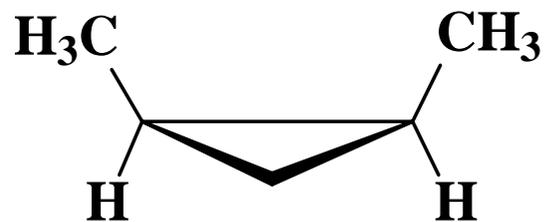
1,3-二甲基-5-乙基环己烷



1-ethyl-3,5-dimethyl cyclohexane

用最低系列原则无法确定选哪一种编号时, 则用下面方法确定编号。中文, 让顺序规则中顺序较小的基团位次尽可能小。英文, 按英文字母顺序, 让字母排在前面的基团位次尽可能小。

实例九

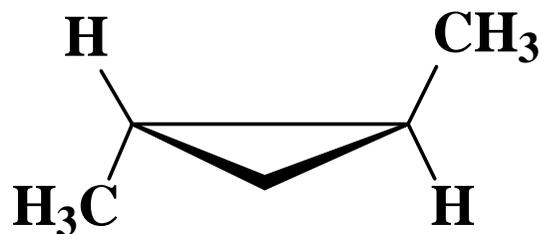


顺-1,2-二甲基环丙烷

cis-1,2-dimethylcyclopropane

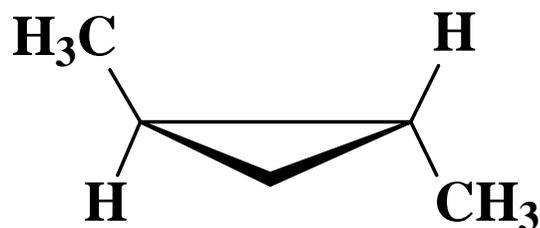


实例十



(1S,2S)-1,2-二甲基环丙烷

(1S,2S)-1,2-dimethylcyclopropane



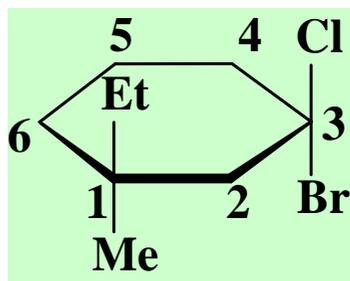
(1R,2R)-1,2-二甲基环丙烷

(1R,2R)-1,2-dimethylcyclopropane

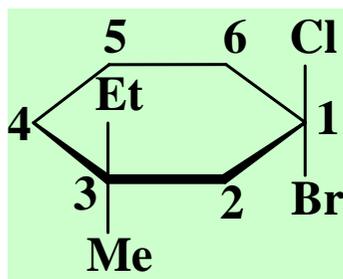
带有二个或二个以上取代基时，分子有对称性，构型用顺反表示。分子没有对称性，构型用R, S表示。



实例十一

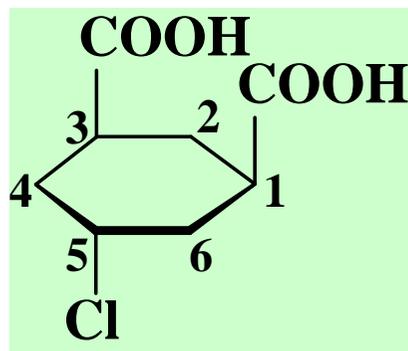


(1S,3S)-1-甲基-1-乙基-3-氯-3-溴环己烷



(1S,3S)-1-bromo-1-chloro-3-ethyl-3-methyl cyclohexane

实例十二



r-1,反-5-氯,顺-3-环己二甲酸

r-1, trans-5-chloro, cis-3-cyclohexanedicarboxylic acid

环上带有三个或更多基团时，若用顺，反表示构型，要选用一个参照基团，通常选1位的基团为参照基团。用**r-1**表示，放在名称的最前面。



三 桥环烷烃的命名

共用二个或多个碳原子的多环烷烃为桥环烷烃

1 桥环烷烃的命名步骤

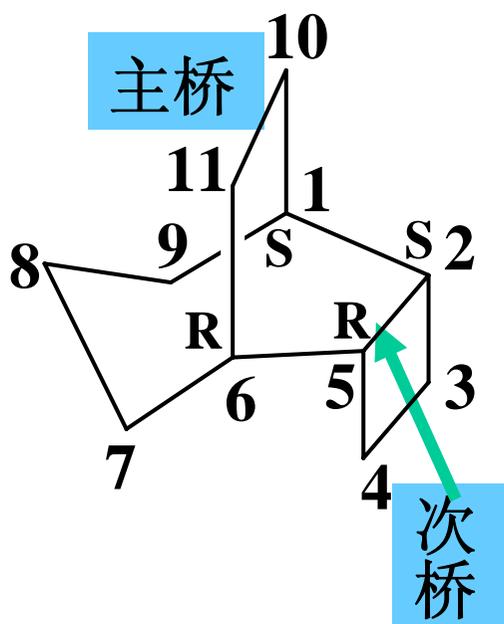
1. 确定母体烃的名称：根据成环碳原子的数目而定；
2. 确定环数：环数等于把化合物切开成开链烃的最少切割次数；
3. 确定主环：碳原子数最多的环为主环；
4. 确定主桥：主环内最长的桥是主桥，其它的桥是次桥。若最长的桥有二个或多个时，要选择较对称地分割主环的桥为主桥。
5. 编号：从主桥的一个桥头开始编号，沿碳多的一半到另一个桥头，再编另一半到起点。环编完后，接着编长桥上的碳原子，再编次桥上的碳原子。
6. 确定方括号内的数字，标明结构。在方括号内，依次写上主桥二侧的碳原子数，不包括桥头碳，先多后少，主桥的碳原子数，各次桥的碳原子数。次桥的碳原子数的右上方要写上环与次桥相连的碳原子编号。
7. 写出母体的名称。“环数+ 带有数字的方括号+ 母体烃名称”三部分共同组成桥环烷烃的名称。



2 命名格式

环数 + 带有数字的方括号 + 母体烃名称

实例十三



连接 次桥碳原子的编号

次桥上的碳原子数

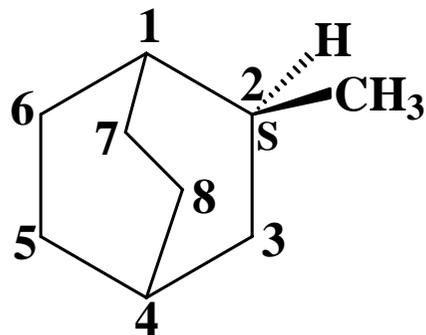
(1*S*,2*S*,5*R*,6*R*)三环 [4.3.2.0^{2,5}] 十一烷

主环两半的碳原子数

主桥上的碳原子数

(1*S*,2*S*,5*R*,6*R*)-Tricyclo[4.3.2.0^{2,5}]undecane

实例十四



(2*S*)-2-甲基二环[2.2.2]辛烷

(2*S*)-2-methylbicyclo[2.2.2]octane

* 三个环都是六元环，无大小之分。此时选取代基多的为主环。

*若环上有取代基，则取代基的编号，名称放在母体前。若有多个取代基：中文命名时，取代基的位次按顺序规则由小到大排列；英文命名时，取代基的位次按英文字母排列；

*编号的方式若有各种选择时，要使取代基的号码尽可能小。



四 螺环烷烃的命名

单环之间共用一个碳原子的多环烷烃为螺环烷烃。



1 螺环烷烃的命名步骤

- (1) 确定母体烃的名称：根据成环碳原子的数目确定母体烃的名称。
- (2) 确定螺数：根据螺原子的个数分为单螺，二螺，三螺等。
- (3) 编号：编号从与端螺原子相邻的一个碳原子开始，沿多环的边使所有的螺原子位号都尽可能小的路径编号。
- (4) 标明结构：确定方括号内的数字，顺着环的编号次序，用数字表明螺原子之间的碳原子数目，依次写在方括号内。
- (5) 写出母体的名称：螺数、带有数字的方括号、母体烃的名称三部分共同组成母体的名称；
- (6) 若有取代基，取代基的编号和名称放在母体前。若有多个取代基，中文命名时，取代基的位次按顺序规则由小到大排列。英文命名时，取代基的位次按英文字母排列。编号的方式若有各种选择时，要使取代基的号码尽可能小

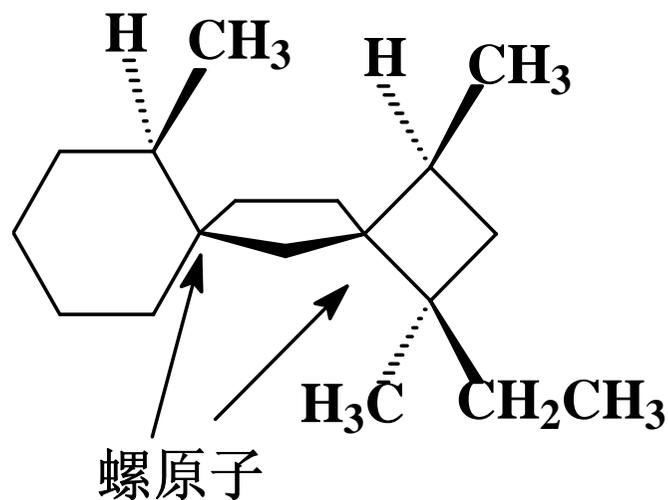


2 命名格式

螺数 + 带数字的方括号 + 母体烃的名称

实例十五

共用的碳原子为螺原子



(1R,3S,4S,6S,7R)-1,3,7-三甲基-1-乙基二螺[3.1.5.2]十三烷

(1R,3S,4S,6S,7R)-1-ethyl-1,3,7-trimethyldispiro[3.1.5.2]tridecane

五 单官能团化合物的系统命名

1 命名步骤

- (1) 确定主链：含官能团的最长链为主链。
- (2) 编号：编号的原则是让官能团的位次尽可能小。
- (3) 定构型
- (4) 写命名：根据下面的格式写出名称

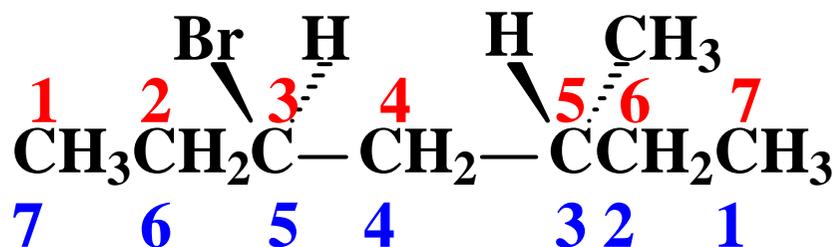
2 命名格式：

构型 + 取代基 + 母体（位置+名称）

当官能团是卤素时，通常将卤原子作为取代基。



实例十六



英文编号

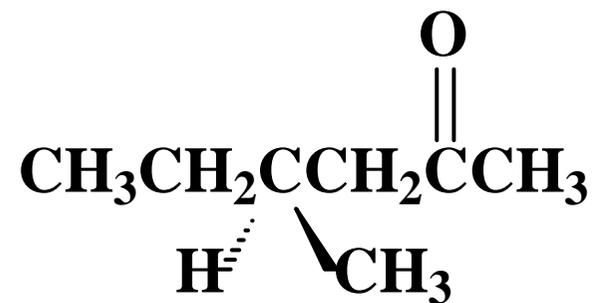
中文编号

(3*R*,5*R*)-3-甲基-5-溴庚烷

(3*R*,5*R*)-3-bromo-5-methylheptane



实例十七

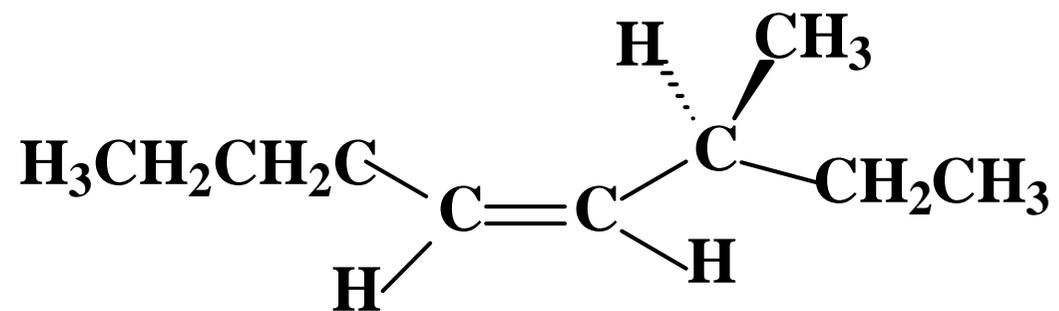


(4S)-4-甲基-2-己酮

(4S)-4-methyl-2-hexanone



实例十八

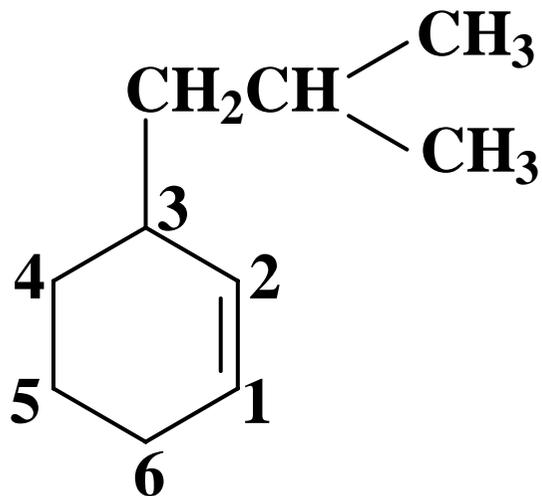


(3S,4Z)-3-甲基-4-辛烯

(3S,4Z)-3-methyl-4-octene



实例十九



3-异丁基环己稀

3-isobutylcyclohexene



六 多官能团化合物的系统命名

1 命名步骤

1. 确定主官能团：当分子中有多个官能团时，表中排在前面的官能团总是主官能团。
2. 确定主链：含主官能团及尽可能多官能团的最长链为主链。
3. 编号：编号的原则是让主官能团的位次尽可能小。
4. 确定构型：
5. 写名称：根据主官能团确定母体的名称，其它官能团作为取代基，各官能团为母体或取代基的名称见书中表。

2 名称格式

构型 + 取代基 + 母体



3 烷烯炔的英文名词词尾变化

烷烃

~ane

烯烃

~ene

炔烃

~yne

烯炔

~enyne

二烯烃

~adiene

二炔烃

~adiyne

一烯二炔

~endiyne

三烯烃

~atriene

三炔烃

~atriyne

三烯一炔

~trienyne

烷基

~yl

烯基

~enyl

炔基

~ynyl

4 各类化合物英文名称词尾变化

| | | | |
|----|-----------------------|-----|----------------------------|
| 丙烷 | propane | 丙酰氯 | propanoyl chloride |
| 丙醇 | propanol | 丙酸酐 | propanoic anhydride |
| 丙醛 | propanal | 丙酰胺 | propanamide |
| 丙酮 | propanone | 丙酸酯 | propanate |
| 丙腈 | propanonitrile | 丙胺 | propylamine |
| 丙酸 | propanoic acid | 丙醚 | dipropyl ether |

