

目 录

无机化学命名原则

| | |
|--|----|
| 1. 总则 | 1 |
| 1.1 目的 | 1 |
| 1.2 化学介词 | 1 |
| 1.3 基和根 | 1 |
| 1.4 特定的基名和根名 | 2 |
| 1.5 离子 | 3 |
| 1.6 特定的词头 | 3 |
| 2. 元素 | 3 |
| 2.1 元素 | 3 |
| 2.2 同位素 | 5 |
| 2.3 原子的质量数、原子序数、电离状态和原子数目在 元素符号中的表示 | 6 |
| 2.4 单质和同素异形体 | 6 |
| 2.5 元素的族名 | 6 |
| 3. 二元化合物 | 7 |
| 3.1 二元化合物 | 7 |
| 3.2 水溶液呈酸性的二元氢化物 | 10 |
| 3.3 过氧化物和过硫化物 | 10 |
| 3.4 特定名称 | 11 |
| 3.5 族名 | 11 |
| 4. 三元、四元等化合物 | 11 |
| 4.1 用特定的根基名称命名 | 11 |
| 4.2 命名的次序 | 12 |
| 5. 简单含氧酸和简单含氧酸盐 | 13 |
| 5.1 简单含氧酸 | 13 |

| | | |
|--------|-----------------------|----|
| 5.2 | 酸酐和酰基 | 14 |
| 5.3 | 取代含氧酸 | 16 |
| 5.4 | 简单含氧酸盐 | 16 |
| 6. | 同多酸和同多酸盐 | 20 |
| 6.1 | 同多酸 | 20 |
| 6.2 | 同多酸盐 | 20 |
| 7. | 杂多酸和杂多酸盐 | 22 |
| 7.1 | 杂多酸 | 22 |
| 7.2 | 杂多酸盐 | 22 |
| 8. | 加成化合物 | 23 |
| 9. | 硼化合物 | 24 |
| 9.1 | 二元硼化合物 | 24 |
| 9.2 | 硼氢化合物 | 24 |
| 9.3 | 硼烷的衍生物 | 29 |
| 9.4 | 含硼基团 | 32 |
| 9.5 | 与硼氢化合物有关的离子 | 36 |
| 9.6 | 无机硼杂环化合物 | 37 |
| 9.7 | 骨架杂原子取代的硼烷 | 38 |
| 9.8 | 加成化合物 | 41 |
| 10. | 配位化合物 | 42 |
| 10.1 | 定义和总则 | 42 |
| 10.1.1 | 定义 | 42 |
| 10.1.2 | 命名总则 | 43 |
| 10.2 | 一般配位化合物的化学式和命名 | 43 |
| 10.2.1 | 中心原子 | 43 |
| 10.2.2 | 中心原子氧化数表示法 | 43 |
| 10.2.3 | 词头 | 44 |
| 10.2.4 | 词尾 | 44 |
| 10.2.5 | 配体位次 | 45 |
| 10.3 | 配体命名 | 45 |

| | | |
|-------|---------------------|----|
| 10.31 | 阴离子配体的命名 | 45 |
| 10.32 | 中性配体和阳离子配体的命名 | 49 |
| 10.33 | 配位原子的标示 | 50 |
| 10.34 | 配体名称的缩写符号 | 52 |
| 10.4 | π 键配合物的命名 | 55 |
| 10.41 | 整比组分的命名 | 55 |
| 10.42 | 结构的标示法 | 55 |
| 10.43 | 二茂铁配合物 | 58 |
| 10.5 | 异构体的命名 | 60 |
| 10.51 | 几何异构体的命名 | 60 |
| 10.52 | 手性异构体 | 66 |
| 10.6 | 多核配合物的命名 | 67 |
| 10.61 | 具有桥联原子或桥联基团的化合物 | 67 |
| 10.62 | 桥联链结构化合物 | 71 |
| 10.7 | 含金属-金属键的化合物 | 72 |
| 10.71 | 中心原子之间仅有金属键连接 | 72 |
| 10.72 | 中心原子之间既有桥联基团又有金属键连接 | 73 |
| 10.73 | 同原子簇化合物 | 73 |

有机化学命名原则

| | |
|--------------|----|
| 1. 总则 | 79 |
| 1.1 基本方法 | 79 |
| 1.2 化学介词 | 79 |
| 1.3 基的命名 | 83 |
| 1.31 基 | 84 |
| 1.32 亚基 | 84 |
| 1.33 次基 | 87 |
| 1.34 游离基 | 88 |
| 1.4 名称中使用的符号 | 88 |
| 1.41 阿拉伯数字 | 88 |
| 1.42 汉文数字和天干 | 89 |

| | | |
|----------------------------------|--------------------|-----|
| 1.43 | 拉丁字母 | 89 |
| 1.44 | 希腊字母 | 89 |
| 1.45 | 标点符号 | 89 |
| 1.5 | 取代基位次在名称中的位置 | 90 |
| 2. 烃 | | 90 |
| 2.1 | 烃的命名 | 90 |
| 2.11 | 碳原子数目的表示法 | 90 |
| 2.12 | 烃的词尾 | 91 |
| 2.13 | 碳链的编号 | 92 |
| 2.2 | 链烃 | 95 |
| 2.21 | 直链烃 | 95 |
| 2.22 | 支链烃 | 95 |
| 2.23 | 主链的择定 | 97 |
| 2.24 | 表示链异构的形容词 | 99 |
| 2.25 | 支链和取代基列出顺序 | 102 |
| 2.3 | 脂环烃 | 103 |
| 2.4 | 芳香烃 | 104 |
| 2.41 | 芳香烃的特定名称 | 104 |
| 2.42 | 稠环烃 | 106 |
| 2.5 | 桥烃 | 110 |
| 2.51 | 简单的桥环 | 110 |
| 2.52 | 桥环的编号 | 111 |
| 2.6 | 螺烃 | 111 |
| 2.61 | 简单的螺环 | 111 |
| 2.62 | 与稠环有关的简单螺环 | 112 |
| 2.63 | 复杂的螺环 | 112 |
| 2.7 | 联环烃 | 113 |
| 2.8 | 轮烯 | 115 |
| 3. 官能团和取代基的位次标明法和位次符号的省略法 | | 115 |
| 3.1 | 官能团和取代基位次的选定 | 115 |
| 3.2 | 用编号来标明位次 | 116 |

| | | |
|-----------|----------------------|------------|
| 3.3 | 用希腊字母来标明位次····· | 117 |
| 3.4 | 位次符号的省略法则····· | 117 |
| 4. | 官能团和取代基 ····· | 119 |
| 4.1 | 官能团和取代基的命名····· | 119 |
| 4.2 | 复基的命名····· | 121 |
| 5. | 杂环化合物 ····· | 121 |
| 5.1 | 基本杂环母核的特定名称····· | 121 |
| 5.2 | 无特定名称的杂环····· | 124 |
| 5.3 | 无特定名称的稠合杂环····· | 125 |
| 5.4 | 使用较少而已见诸文献的杂环····· | 128 |
| 6. | 立体化学 ····· | 129 |
| 6.1 | 次序规则····· | 129 |
| 6.2 | 顺、反异构····· | 134 |
| 6.3 | 手性中心的构型表示法····· | 139 |
| 6.4 | 构象····· | 142 |
| 7. | 变丰化合物 ····· | 144 |
| 7.1 | 同位素取代化合物····· | 145 |
| 7.2 | 特定标记化合物····· | 145 |
| 7.3 | 选择性标记化合物····· | 145 |
| 7.4 | 非选择性标记化合物····· | 146 |
| 7.5 | 全标记化合物····· | 146 |
| 7.6 | 均匀标记化合物····· | 147 |
| 7.7 | 贫同位素化合物····· | 147 |
| 8. | 天然化合物 ····· | 147 |
| 8.1 | 甾族化合物····· | 147 |
| 8.2 | 碳水化合物(即糖类化合物)····· | 153 |
| 8.3 | 核酸····· | 155 |
| 8.4 | 萜类化合物····· | 155 |
| 8.5 | 有机酸····· | 159 |

1. 总 则

1.1 目 的

本命名原则的目的是：(1) 确定元素的名称；(2) 建立一套无机化合物的命名规则，使根据这套规则定出的名称，能够确切而简明地表示无机化合物的组成和结构。

1.2 化 学 介 词

化合物的系统名称是由其基本构成部分名称连缀而成的。化学介词，在文法上就是连缀基本构成部分名称以形成化合物名称的连缀词。这些连缀词分别表明相应的结合情况，兹列举如下：

化——表示简单的化合。如氯原子(Cl)与钠原子(Na)化合而成的NaCl就叫氯化钠；又如羟基(HO—)与钾原子(K)化合而成的KOH就叫氢氧化钾。

合——表示分子与分子或分子与离子相结合，如 $\text{CaCl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ 叫一水合氯化钙。 H_3O^+ 叫水合氢离子。

代——(1) 表示取代了母体化合物中的氢原子，如 $\text{ClCH}_2 \cdot \text{COOH}$ 叫氯代乙酸； NH_2Cl 叫氯代氨； NHCl_2 叫二氯代氨。(2) 表示硫(或硒、碲)取代氧，如 $\text{H}_2\text{S}_2\text{O}_3$ 叫硫代硫酸； HSeCN 叫硒代氰酸。

聚——表示两个以上同种的分子互相聚合，如 $(\text{HF})_2$ 叫二聚氟化氢， $(\text{HOCN})_3$ 叫三聚氰酸， $(\text{NaPO}_3)_6$ 叫六聚偏磷酸钠。

1.3 基 和 根

基和根是指在化合物中存在的原子集团，若以共价键与其他组分结合者叫做基，以电价键与其他组分结合者叫做根。

基和根一般均从其母体化合物命名,称为某基或某根。

例:

| | | | |
|----------------------------------|-----|-----------------------------|------|
| NH_3 | 氨 | NH_2- | 氨基 |
| H_2SO_4 | 硫酸 | HSO_4^- | 硫酸氢根 |
| | | SO_4^{2-} | 硫酸根 |
| H_2SiF_6 | 氟硅酸 | SiF_6^{2-} | 氟硅酸根 |
| $\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4$ | 草酸 | $\text{C}_2\text{O}_4^{2-}$ | 草酸根 |

1.4 特定的基名和根名

基和根也可以联缀其所包括的元素名称来命名,价已满的元素名放在前面,未满的放在后面。

例如:

| | | | |
|--------------|-----|--------------|-----|
| $\text{HO}-$ | 氢氧基 | $\text{HS}-$ | 氢硫基 |
|--------------|-----|--------------|-----|

个别的基和酸,为了命名简便起见,给有特定名称。无机化合物中常用的特定根、基名称不多,在这里全部列出如下:

羟基: $\text{HO}-$ 也可以称作氢氧基 羟(音枪 qiāng)

巯基: $\text{HS}-$ 也可以称作氢硫基 巯(音球 qiú)

羰基: $\text{OC}=\text{}$ 羰(音汤 tāng)

氰基: $\text{NC}-$ 氰(音情 qíng)

叠氮基: N_3-

铵根: NH_4^+ 铵(音俺 ǎn)

酰基: 含氧酸分子中去掉 $-\text{OH}$ 基后剩下的基叫作酰基,酰(音先 xiān),某酸的全部 $-\text{OH}$ 均已去掉时,就从酸名命名为某酰(基)如果只去掉 m 个 $-\text{OH}$ 基,则称为某酸 m 酰(基),基字通常可以略去(参阅 5.2)。[注意: 酰本字为醯,今简化为酰]

H_3PO_4 磷酸 H_2PO_3- 磷酸一酰(基)

$\text{HPO}_2=\text{}$ 磷酸二酰(基)

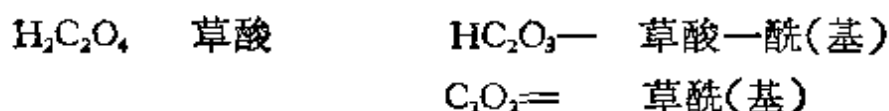
$\text{PO}=\text{}$ 磷酰(基)

HNO_3 硝酸

NO_2- 硝酰

HNO_2 亚硝酸

$\text{NO}-$ 亚硝酰



1.5 离 子

元素的离子,根据元素名称及其电化价来命名。代表电化价的词头可参阅 3.1 第(1)项规定。

例:

| | | | |
|---------------|-----|------------------|------|
| Cl^- | 氯离子 | Zn^{2+} | 锌离子 |
| I^- | 碘离子 | Al^{3+} | 铝离子 |
| H^+ | 氢离子 | Fe^{3+} | 铁离子 |
| Na^+ | 钠离子 | Fe^{2+} | 亚铁离子 |

带电的原子团,已如上述称为某根,若需指明其为离子时则称为某离子或某根离子:

例:

| | |
|---------------------|--------|
| NH_4^+ | 铵离子 |
| HSO_4^- | 硫酸氢根离子 |
| SO_4^{2-} | 硫酸根离子 |
| SiF_6^{2-} | 氟硅酸根离子 |
| PO_4^{3-} | 磷酸根离子 |

1.6 特定的词头

亚: 比常见的基少含一个氢原子而多一个化合价的基,用词头“亚”表示,如: NH_2- 叫氨基; $\text{NH}=-$ 叫亚氨基(亚字在简单含氧酸中的用法,参见 5.1)。

过: $-\text{O}-\text{O}-$ 称为过氧基, $-\text{S}-\text{S}-$ 称为过硫基(参阅 3.3 及 5.1)。

2. 元 素

2.1 元 素

兹将元素的名称及其读音规定如下:

元素的名称及其读音

| 原子序数 | 符号 | 名称 | 读音 | 汉语拼音 | 原子序数 | 符号 | 名称 | 读音 | 汉语拼音 |
|------|----|----|----|------|------|----|----|----|------|
| 1 | H | 氢 | 轻 | qīng | 37 | Rb | 铷 | 如 | rú |
| 2 | He | 氦 | 亥 | hài | 38 | Sr | 锶 | 思 | sī |
| 3 | Li | 锂 | 里 | lǐ | 39 | Y | 钇 | 乙 | yǐ |
| 4 | Be | 铍 | 皮 | pí | 40 | Zr | 锆 | 告 | gào |
| 5 | B | 硼 | 朋 | péng | 41 | Nb | 铌 | 尼 | ní |
| 6 | C | 碳 | 炭 | tàn | 42 | Mo | 钼 | 日 | mù |
| 7 | N | 氮 | 淡 | dàn | 43 | Te | 碲 | 得 | dé |
| 8 | O | 氧 | 养 | yǎng | 44 | Ru | 钌 | 了 | liǎo |
| 9 | F | 氟 | 弗 | fú | 45 | Rh | 铑 | 老 | lǎo |
| 10 | Ne | 氖 | 乃 | nǎi | 46 | Pd | 钯 | 把 | bǎ |
| 11 | Na | 钠 | 纳 | nà | 47 | Ag | 银 | 银 | yín |
| 12 | Mg | 镁 | 美 | měi | 48 | Cd | 镉 | 隔 | gé |
| 13 | Al | 铝 | 吕 | lǚ | 49 | In | 铟 | 因 | yīn |
| 14* | Si | 硅 | 归 | guī | 50 | Sn | 锡 | 席 | xí |
| 15 | P | 磷 | 邻 | lín | 51 | Sb | 锑 | 梯 | tī |
| 16 | S | 硫 | 流 | liú | 52 | Te | 碲 | 帝 | dì |
| 17 | Cl | 氯 | 绿 | lǜ | 53 | I | 碘 | 典 | diǎn |
| 18 | Ar | 氩 | 哑 | yǎ | 54 | Xe | 氙 | 仙 | xiān |
| 19 | K | 钾 | 甲 | jiǎ | 55 | Cs | 铯 | 色 | sè |
| 20 | Ca | 钙 | 丐 | gài | 56 | Ba | 钡 | 贝 | bèi |
| 21 | Sc | 钪 | 亢 | kàng | 57 | La | 镧 | 兰 | lán |
| 22 | Ti | 钛 | 太 | tài | 58 | Ce | 铈 | 市 | shì |
| 23 | V | 钒 | 凡 | fán | 59 | Pr | 镨 | 普 | pǔ |
| 24 | Cr | 铬 | 各 | gè | 60 | Nd | 钕 | 女 | nǚ |
| 25 | Mn | 锰 | 猛 | měng | 61 | Pm | 钷 | 叵 | pǒ |
| 26 | Fe | 铁 | 铁 | tiě | 62 | Sm | 钐 | 衫 | shān |
| 27 | Co | 钴 | 古 | gǔ | 63 | Eu | 铕 | 有 | yǒu |
| 28 | Ni | 镍 | 臬 | niè | 64 | Gd | 钆 | 轧 | gá |
| 29 | Cu | 铜 | 同 | tóng | 65 | Tb | 铽 | 忒 | tè |
| 30 | Zn | 锌 | 辛 | xīn | 66 | Dy | 镝 | 滴 | dī |
| 31 | Ga | 镓 | 冢 | jiǎ | 67 | Ho | 铥 | 火 | huǒ |
| 32 | Ge | 锗 | 者 | zhě | 68 | Er | 铒 | 耳 | ěr |
| 33 | As | 砷 | 申 | shēn | 69 | Tm | 铥 | 云 | diū |
| 34 | Se | 硒 | 西 | xī | 70 | Yb | 镱 | 意 | yì |
| 35 | Br | 溴 | 秀 | xiù | 71 | Lu | 镥 | 鲁 | lǔ |
| 36 | Kr | 氪 | 克 | kè | 72 | Hf | 铪 | 哈 | hā |

续表

| 原子序数 | 符号 | 名称 | 读音 | 汉语拼音 | 原子序数 | 符号 | 名称 | 读音 | 汉语拼音 |
|------|----|----|----|------|------|-----|---------|----|------|
| 73 | Ta | 钽 | 坦 | tǎn | 92 | U | 铀 | 由 | yóu |
| 74 | W | 钨 | 乌 | wū | 93 | Np | 镎 | 拿 | ná |
| 75 | Re | 铼 | 来 | lái | 94 | Pu | 钚 | 不 | bù |
| 76 | Os | 锇 | 鹅 | é | 95 | Am | 镅 | 眉 | méi |
| 77 | Ir | 铱 | 衣 | yī | 96 | Cm | 镎 | 局 | jú |
| 78 | Pt | 铂 | 博 | bó | 97 | Bk | 锫 | 陪 | péi |
| 79 | Au | 金 | 今 | jīn | 98 | Cf | 锎 | 开 | kāi |
| 80 | Hg | 汞 | 拱 | gǒng | 99 | Es | 镱 | 哀 | āi |
| 81 | Tl | 铊 | 他 | tā | 100 | Fm | 镭 | 费 | fèi |
| 82 | Pb | 铅 | 千 | qiān | 101 | Md | 镈 | 门 | mén |
| 83 | Bi | 铋 | 必 | bì | 102 | No | 镉 | 诺 | nuò |
| 84 | Po | 钋 | 泼 | pō | 103 | Lr | 镥 | 劳 | láo |
| 85 | At | 砹 | 艾 | ài | 104 | Rf | 铈 | 卢 | lú |
| 86 | Rn | 氡 | 冬 | dōng | 105 | Ha | 铹 | 罕 | hǎn |
| 87 | Fr | 钫 | 方 | fāng | 106 | Uuh | 106 号元素 | | |
| 88 | Ra | 镭 | 雷 | léi | 107 | Uus | 107 号元素 | | |
| 89 | Ac | 锕 | 阿 | ā | 108 | Uuo | 108 号元素 | | |
| 90 | Th | 钍 | 土 | tǔ | 109 | Uue | 109 号元素 | | |
| 91 | Pa | 镤 | 仆 | pú | | | | | |

* 114 号元素过去叫做矽,但因矽的同音字太多,所以改称砵。

2.2 同 位 素

一种元素的同位素一般均不另定名称,而在元素的名称之后加同位素的质量数。

例:

^{235}U 铀 235

^{24}Na 钠 24

氢的同位素原有的名称和符号可以保留:

^1H 氕[音撇]

^2H 或 D 氘[音刀]

^3H 或 T 氚[音川]

2.3 原子的质量数、原子序数、电离状态和 原子数目在元素符号中的表示

元素的质量数、原子序数、离子的电荷数和原子的个数分别在元素符号的四个角上加以标明：

左上角标明质量数

左下角标明原子序数

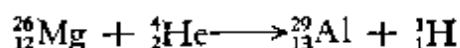
右上角标明离子的电荷数

右下角标明原子的个数

例如： $^{32}_{16}\text{S}_2^{2+}$

表示一个由两个硫原子组成的、电离成 $2+$ 态的硫分子，其原子序数为16，质量数为32。

一个核反应可以写成如下的方程式：



2.4 单质和同素异形体

单质名称一般均与元素相同。通常为气态的单质元素可称为某气，例如氢气。金属单质可在元素名称前冠以金属二字，例如金属钠。非金属固体元素的后面可以加一素字，例如碘素。此外，在行文中也可以适当地采用一些惯用的双音单质俗名如黄金、硫磺、白银或水银等。

同素异形体可以在元素名前加上表示其特性的形容词来命名。此外也可以采用 α , β , γ , λ 等希腊字母。

例如：臭氧(O_3)，无定形硒，胶态硒，活性碳，斜方硫， α 硫，黄磷，红磷，紫磷，黑磷等。

2.5 元素的族名

周期表中第Ⅰ族元素通称为稀有气体。

周期表中第一族主族元素通称为碱金属元素。

周期表中第二族主族元素通称为碱土金属元素。

周期表中第七族主族元素氟、氯、溴、碘、砷通称为卤素。

硫、硒、碲通称为硫属元素。铁、钴、镍通称为铁系元素；钪、铪、钽、铀、铂通称为铂系元素。

周期表中 57 到 71 号元素通称为镧系元素。Y 和镧系元素一起可以统称为稀土金属。89 到 103 号的元素统称为锕系元素。104 号元素起的元素称为锕系后元素。

3. 二元化合物

3.1 二元化合物

只含两种元素的化合物叫做二元化合物。二元化合物的名称是把两种元素的名称中加化学价字“化”字缀合而成的。在名称中,电负性较强的元素名称放在前面,电负性较弱的元素名称放在后面。化合物中两种元素的比例可以有两种方法表示,即:(I)标明电正性组分的化合价,(II)标明化学组成。为求每种二元化合物尽可能只用一种命名方法命名,特分别规定如下:

(I) 标明电正性组分的化合价

(1) 极性二元化合物中,电正性元素通常仅有一种化合价者,用(I)法命名,其电正性元素的化合价不需另加词头标明。

例:

| | | | | | |
|-------------------|-----|------------------|-----|--------------------------------|-----|
| HCl | 氯化氢 | ZnI ₂ | 碘化锌 | Al ₂ O ₃ | 氧化铝 |
| LiH | 氢化锂 | BeF ₂ | 氟化铍 | ZrO ₂ | 氧化锆 |
| NaCl | 氯化钠 | MgS | 硫化镁 | K ₂ O | 氧化钾 |
| CaCl ₂ | 氯化钙 | | | | |

(2) 极性化合物中,电正性元素通常仅有两种化合价,而所形成的化合物其组成又与此两项变价之一相符合时,用(I)法命名。

例如:

Fe 的化合物,FeO 及 Fe₂O₃ 就用(I)法命名,而 Fe₃O₄ 则不用此法命名。

电正性元素最常见的化合价,在名称中用词头正字表示,正字一般均予省去。低于常见化合价的价数用词头亚字表示,高于常见化合价的价数用词头高字表示。

例:

| | | | |
|-------------------------|------|-------------------------|------|
| CuCl_2 | 氯化铜 | GaCl_3 | 氯化镓 |
| CuCl | 氯化亚铜 | GaCl_2 | 氯化亚镓 |
| AgF_2 | 氟化高银 | PbO_2 | 氧化高铅 |
| AgF | 氟化银 | PbO | 氧化铅 |
| AuI_3 | 碘化金 | CrCl_3 | 氯化铬 |
| AuI | 碘化亚金 | CrCl_2 | 氯化亚铬 |
| HgO | 氧化汞 | Fe_2O_3 | 氧化铁 |
| Hg_2O | 氧化亚汞 | FeO | 氧化亚铁 |
| SnCl_4 | 氯化锡 | Co_2O_3 | 氧化高钴 |
| SnCl_2 | 氯化亚锡 | CoO | 氧化钴 |
| Ni_2O_3 | 氧化高镍 | TlI_3 | 碘化铊 |
| NiO | 氧化镍 | TlI | 碘化亚铊 |

(II) 标明化学组成*

凡不属(I)法命名的二元化合物,都用此项方法命名,兹列举如下:

(1) 非极性二元化合物都用(II)法命名。

例:

| | | | |
|------------------------|-------|-----------------------|-------|
| N_2O | 一氧化二氮 | B_4C | 一碳化四硼 |
| NO | 一氧化氮 | Fe_3C | 一碳化三铁 |
| NO_2 | 二氧化氮 | FeP | 一磷化铁 |
| N_2O_3 | 三氧化二氮 | Fe_2P | 一磷化二铁 |
| N_2O_4 | 四氧化二氮 | Fe_3P | 一磷化三铁 |

* 为求(I)、(II)两类名词不会混淆起见,必须规定(II)类名词至少包括有一个数字词头,以免与名词中根本没有数字词头的(I)类名词相混。因此当(II)类名称中有两个“一”字时就不能全部略去,而只能略去后一个“一”字。例如:一氧化一氮就只能简化成一氧化氮,不宜简化为氧化一氮,更不可简化成氧化氮。

N_2O_5 五氧化二氮 OF_2 二氟化氧

(2) 极性二元化合物中, 电正性元素虽通常仅有一种或两种化合价, 但所形成的二元化合物其组成不符合常见的化合价时(如: AlO , Fe_3O_4 等), 或其电化价尚不清楚时(如: As_2S_2) 也用(II)法命名。

例:

| | | | |
|-------------------------|---------|-------------------------|-------|
| AlCl | 一氯化铝 | FeS_2 | 二硫化铁 |
| AlO | 一氧化铝 | Fe_3S_4 | 四硫化三铁 |
| Fe_3O_4 | 四氧化三铁 | Fe_7S_8 | 八硫化七铁 |
| KO_2 | 二氧化(一)钾 | Cs_2S_3 | 三硫化二铯 |
| K_2O_3 | 三氧化二钾 | Cs_2S_4 | 四硫化二铯 |
| K_2O_4 | 四氧化二钾 | Cs_2S_5 | 五硫化二铯 |
| CaO_4 | 四氧化钙 | Cs_2S_6 | 六硫化二铯 |
| BaO_4 | 四氧化钡 | As_2S_2 | 二硫化二砷 |
| Sm_4O_9 | 九氧化四钐 | As_4S_4 | 四硫化四砷 |

(3) 化合价通常不止两种的电正性元素, 其二元化合物用(II)法命名。

例:

| | | | |
|-------------------------|---------|-----------------|------|
| MnO | 一氧化(一)锰 | RuCl_2 | 二氯化钌 |
| Mn_2O_3 | 三氧化二锰 | RuCl_3 | 三氯化钌 |
| MnO_2 | 二氧化锰 | RuCl_4 | 四氯化钌 |
| Mn_3O_4 | 四氧化三锰 | RuF_5 | 五氟化钌 |
| Mn_2O_7 | 七氧化二锰 | RuO_4 | 四氧化钌 |

(4) 也可以用带括号的罗马数字放在元素的后面, 以标明其价数, 例如氧化铁(II), 氧化铁(III)。

(5) 对于非整比化合物, 如某些同晶置换物, 金属间化合物, 间隙化合物等, 最好是用化学式来表示, 因为严格的合乎逻辑的名称都很不方便, 只是在编辑索引时才不得不使用它。

例如 $\text{A}_{m+x}\text{B}_{n-x}\text{C}_p$, $\text{Ag}_{5\pm x}\text{Cd}_{8\mp x}$, $\text{PdH}_x (0.5 < x < 0.7)$, $\text{FeO}_{1+x} (0.09 < x < 0.19)$ 。

3.2 水溶液呈酸性的二元氢化物

水溶液呈酸性的二元氢化物,除按一般二元化合物命名外,在水溶液中时,还可以视作无氧酸(也叫:氢酸),命名为氢某酸;但是它们的盐则仅能视作极性二元化合物命名,称为某化某。呈 $M_x(\text{SH})_x$ 式的酸式氢硫酸盐宜称为氢硫化某(参阅 1.4)。

例: 二元氢化物:

| 化学式 | 气态纯物质 | 其水溶液 |
|------------------------|-----------|--------|
| | 视作一般二元化合物 | 视作无氧酸 |
| H_2F_2 | 氟化氢 | 氢氟酸 |
| HCl | 氯化氢 | 氢氯酸;盐酸 |
| HBr | 溴化氢 | 氢溴酸 |
| HI | 碘化氢 | 氢碘酸 |
| H_2S | 硫化氢 | 氢硫酸 |
| HCN^* | 氰化氢 | 氢氰酸 |
| HN_3 | 叠氮化氢 | (氢)叠氮酸 |

无氧酸的盐:

| | | | |
|-----------------|------|-----------------------|------|
| KCl | 氯化钾 | Na_2S | 硫化钠 |
| HgBr | 溴化亚汞 | HgS | 硫化汞 |
| HgBr_2 | 溴化汞 | MnCl_2 | 二氯化锰 |
| MnCl_3 | 三氯化锰 | | |
| MnCl_4 | 四氯化锰 | | |

酸式氢硫酸盐:

| | |
|--------------------------|------|
| NaSH | 氢硫化钠 |
| $\text{Ba}(\text{SH})_2$ | 氢硫化钡 |

3.3 过氧化物和过硫化物

仅含过氧基—O—O—和过硫基—S—S—(参阅 1.6)的二元化

* 注意 HCN 并非二元化合物。但因 CN 基已有特定名称,故从一般二元氢化物命名。

合物*可分别称为过氧化某和过硫化某。

| | | |
|-------------------------|---|------|
| H_2O_2 | $\text{H}-\text{O}-\text{O}-\text{H}$ | 过氧化氢 |
| Na_2O_2 | $\text{Na}-\text{O}-\text{O}-\text{Na}$ | 过氧化钠 |
| K_2O_2 | $\text{K}-\text{O}-\text{O}-\text{K}$ | 过氧化钾 |
| Na_2S_2 | $\text{Na}-\text{S}-\text{S}-\text{Na}$ | 过硫化钠 |

3.4 特定名称

个别重要的二元化合物,给予特定名称如下:

| | |
|-----------------|-------|
| NH_3 | 氨[音安] |
| $(\text{CN})_2$ | 氰[音情] |

3.5 族名

卤素的二元化合物可总称为卤化物。

硫、硒、碲三个元素的二元化合物,可以总称为硫属化物。

4. 三元、四元等化合物

4.1 用特定的根基名称命名

三元、四元等化合物,若其组成的根基具有特定的名称时,则在尽可能的情况下,采用二元化合物的命名法(参阅 1.3 和 1.4)。

例:

| | | | |
|--------------------------|-------|------------------------------|---------|
| KCN | 氰化钾 | BaSO_4 | 硫酸钡 |
| NH_4Cl | 氯化铵 | $\text{Co}(\text{IO}_3)_2$ | 碘酸钴 |
| NaOH | 氢氧化钠 | $\text{Fe}(\text{CO})_4$ | 四羰合铁 |
| $\text{Co}(\text{OH})_2$ | 氢氧化钴 | SO_2Cl_2 | 硫酰氯; |
| $\text{Co}(\text{OH})_3$ | 氢氧化高钴 | | 氯化硫酰 |
| $\text{Al}(\text{OH})_3$ | 氢氧化铝 | $\text{SO}_2(\text{NH}_2)_2$ | 硫酰(二)胺; |

* 含有 O_2- 及 $-\text{S}-\text{S}_2-\text{S}-$ 等基的化合物均不属此条命名之规定,而属于 3.1 第 (II) 项的规定。

| | | | |
|-----------------|--------|------------------------|------|
| | 二氨基硫酸 | | |
| SOCl_2 | 亚硫酸氯 | | |
| SOBrCl | 亚硫酸氯溴； | NO_2Cl | 硝酰氯； |
| | 氯溴化亚硫酸 | | 氯化硝酰 |

4.2 命名的次序

几种电负性组分同时与一种电正性组分化合时，或几种电正性组分同时与一种电负性组分化合时，在尽可能的情况下，采用二元化合物的命名法；在名称中将电负性较强的组分名放在前面，电正性较强的组分名放在后面。这种名称中的数字词头，在不致误会时，可以略去。

按照这个规定，混盐、复盐（此两者参阅 5.4(III)）、一般卤氧化物（酰基卤的命名参阅 4.1）、卤硫化物及金属代铵化物等的名称有如下列：

例：混盐：

| | |
|----------------------------|--------|
| BaClF | 氟氯化钡 |
| CaClNO_3 | 氯化硝酸钙 |
| ZrBr_2Cl_2 | 二氯二溴化锆 |

复盐：

| | |
|---|-------|
| $\text{KAl}(\text{SO}_4)_2$ | 硫酸铝钾 |
| $(\text{NH}_4)_2\text{Fe}(\text{SO}_4)_2$ | 硫酸亚铁铵 |

卤硫化物：

| | |
|------------------|--------|
| SiSBr_2 | 二溴一硫化硅 |
|------------------|--------|

卤氧化物：

| | |
|---------------------------|----------------|
| CrO_2Cl_2 | 二氯二氧化铬； 铬酰氯 |
| MoO_2Cl_2 | 二氯二氧化钼； 钼酰氯 |
| MoOCl_3 | 三氯氧化钼 |
| MoOCl_4 | 四氯氧化钼 |

| | |
|----------------------------------|--------------|
| $\text{Mo}_2\text{O}_3\text{Cl}$ | 五氯三氧化二钼 |
| VOCl | 一氯一氧化钒 |
| VOCl_2 | 二氯一氧化钒;二氯化氧钒 |
| VOCl_3 | 三氯一氧化钒 |
| $(\text{VO})_2\text{Cl}$ | 一氯二氧化二钒 |
| WO_2Cl_2 | 二氯二氧化钨;钨酰氯 |

金属代铵化物:

$(\text{NH}_2\text{Hg}_2)\text{Cl}$ 氯化二亚汞铵

5. 简单含氧酸和简单含氧酸盐

5.1 简单含氧酸

每分子中仅含一个成酸元素的简单含氧酸, 将其在自由状态下较为常见者定名为某酸。其他诸酸, 则视其中成酸元素的氧化值较正酸高低多少, 及其有无 $-\text{O}-\text{O}-$ 结构, 而采用一定的词头来命名。

一个分子中成酸原子不止一个, 而各成酸原子之间又系直接相连者, 称为“连若干某酸”, 在某酸的前面冠以相当的词头, 下同。

由两个简单的一价酰基取代 $\text{H}-\text{O}-\text{O}-\text{H}$ 中的氢而成的过酸, 为含氧酸中常见的一种过酸, 称为“过二某酸”。

由两个简单含氧酸缩去一分子水的同多酸 (参阅 6) 甚为常见, 除可按 6.1 命名为“一缩二某酸”外, 一般均习用焦字作词头来命名, 也有用重 (音虫 *chóng*) 字作为词头命名的如 $\text{H}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ 就命名为重铬酸。

设某元素最常见的含氧酸的化学式为 H_mXO_n , 其中 X 的氧化值等于 $2n - m$, 则此元素的其他简单含氧酸, 可按其化学式和结构分别加上下列词头来命名。

偏——自一个分子正酸缩去一分子水而成的酸, 定名为偏酸。也可以称做一缩某酸。

原——酸分子中氢氧基的数目和成酸元素的氧化值相等时,

可用词头“原”字来表示，称为“原某酸”。原酸或呈自由状态而存在，或呈为盐或酯而存在。

例：

| | | | |
|--------------------------|------|--------------------------|-----|
| H_4CO_4 | 原碳酸 | H_6TeO_6 | 原碲酸 |
| H_4SiO_4 | 原硅酸* | | |

硫代——在含氧酸中用硫原子 S 代替氧原子 O 而得的酸统称为硫代酸各叫做“几硫代某酸”，一字可以省去。其他硫属取代氧的酸，可依此而命名为碲(碲)代某酸。

例：

| | | | |
|----------------------------------|-------|----------------|--------|
| $\text{H}_2\text{S}_2\text{O}_3$ | 硫代硫酸 | HSCN | 硫(代)氰酸 |
| H_2CS_3 | 三硫代碳酸 | HSnCN | 碲(代)氰酸 |

铁的含氧酸——理论上存在的铁的含氧酸 HFeO_3 及 H_2FeO_4 分别命名为(正)铁酸和高铁酸，其盐则分别称为(正)铁酸盐和高铁酸盐。也可以更好地称为铁(III)酸和铁(VI)酸。

5.2 酸酐和酰基

简单含氧酸完全脱水后形成的二元氧化物，可按相应的氧化物来命名，如 N_2O_5 叫做五氧化二氮，其俗名叫硝酸酐。

简单含氧酸脱去氢氧基后余下的基叫做酰基，酰基从原来的酸名命名，若酸中全部的氢氧基均已除去，就称作某酰(基)，若仅除去一部分氢氧基，则命名为某酸几酰(基)，几指除去的氢氧基数目而言，基字通常可予略去(参阅 1.4)。— SO_2OH 和 — SOOH 另定名称为磺基和亚磺基。

例：酸酐：

| 化学式 | 视作二元化合物 | 视作酸酐时的俗名 |
|------------------------|---------|----------|
| CO_2 | 二氧化碳 | 碳(酸)酐 |
| N_2O_5 | 五氧化二氮 | 硝(酸)酐 |
| N_2O_3 | 三氧化二氮 | 亚硝(酸)酐 |

* H_4SiO_4 称为硅酸。

分子中仅含一个原子成酸元素的简单含氧酸

| 成酸元素的氧化值 | 化 学 式 | 词 头 | 例 | 解 |
|----------------|---------------------------------|-----|------------|-----------------------------|
| $(2n - m) + 2$ | $H_m XO_{n+1}$ (有一O—O—结构) | 过 | | HNO_3 H_3PO_3 H_2SO_3 |
| $(2n - m) + 2$ | $H_m XO_{n+1}$ (无—O—O—结构) | 高 | $HClO_4$ | |
| $(2n - m) + 1$ | $H_{m-1} XO_n$ (此下均无—O—O—结构) | 高 | $HMnO_4$ | |
| $(2n - m)$ | $H_m XO_n$ | | H_2MnO_4 | HNO_3 H_3PO_4 H_2SO_4 |
| $(2n - m) - 2$ | $H_m XO_{n-1}$ | 亚 | $HClO_2$ | HNO_2 H_3PO_2 H_2SO_2 |
| $(2n - m) - 3$ | $H_{m+1} XO_{n-1}$ | 次 | | H_2NO_2 |
| $(2n - m) - 4$ | $H_m XO_{n-2}$ | 次 | $HClO$ | H_3PO_2 H_2SO_2 |

分子中含一个原子以上成酸元素的简单含氧酸

| 成酸元素的价数 | 化 学 式 | 词 头 | 例 | 解 |
|--------------|---|-----------|-------------|--------------|
| $2n - m$ | $H_{m-1} O_{n-1} XO XO_{n-1} H_{m-1}$ | (一缩)二;焦;重 | $H_4P_2O_7$ | $H_2S_2O_7$ |
| $2n - m - 2$ | $H_{m-1} O_{n-2} XO XO_{n-2} H_{m-1}$ | (一缩)二亚 | $H_4P_2O_6$ | $H_2S_2O_6$ |
| $2n - m$ | $H_{m-1} O_{n-1} XXO_{n-1} H_{m-1}$ | 连二 | $H_4P_2O_6$ | $IL_2S_2O_6$ |
| $2n - m - 2$ | $H_{m-1} O_{n-2} XXO_{n-2} H_{m-1}$ | 连二亚 | | $IL_2S_2O_4$ |
| $2n - m - 3$ | $H_m O_{n-2} XXO_{n-2} H_m$ | 连二次 | | $H_2N_2O_2$ |
| $10/s^*$ | $H_{m-1} O_{n-1} XX_{s-1} XO_{n-1} H_{m-1}$ | 连多 | | $H_2S_3O_6$ |
| $2n - m$ | $H_{m-1} O_{n-1} XO XO_{n-1} H_{m-1}$ | 过二 | $H_4P_2O_8$ | $H_2S_2O_8$ |

* 此中 $s = 多$, 适用于连多酸。

| | | |
|---------------|------|--------|
| SO_3 | 三氧化硫 | 硫(酸)酐 |
| SO_2 | 二氧化硫 | 亚硫(酸)酐 |

酰基(例见 1.4):

| | |
|-----------------------------------|----------|
| $\text{SO}_2=$ | 硫(酸)酰(基) |
| $\text{CrO}_2=$ | 铬(酸)酰(基) |
| $\text{Cr}(\text{OH})\text{O}_2-$ | 铬酸一酰(基) |
| VO_2- | 钒(酸)酰(基) |
| $\text{WO}_2=$ | 钨(酸)酰(基) |

5.3 取代含氧酸

他基取代含氧酸中氢氧基后形成的酸叫做取代含氧酸,一般均从原来的酸命名为几某基某酸,一字均予略去,基字最好不要省略。惟含 $-\text{SO}_3\text{H}$ 者称作某磺酸,含 $-\text{SO}_2\text{H}$ 者称作某亚磺酸。

例:

| | |
|--|--------|
| $\text{NH}_2\text{PO}(\text{OH})_2$ | 氨基磷酸 |
| $(\text{NH}_2)_2\text{P}_2\text{O}_3(\text{OH})_2$ | 二氨基焦磷酸 |
| $\text{ClCrO}_2(\text{OH})$ | 氯基铬酸 |
| $\text{Cl}\cdot\text{SO}_2\text{OH}$ | 氯基磺酸 |
| $\text{NH}_2\cdot\text{SO}\cdot\text{OH}$ | 氨基亚磺酸 |
| $\text{NH}\cdot\text{SO}_2\cdot\text{OH}$ | 亚氨基磺酸 |

5.4 简单含氧酸盐

(I) 中式盐。酸中能电离的氢全部被金属根或电正性根取代而成的中式盐,命名为某酸某(金属)。

金属元素价数的标明法

在含氧酸盐名称中,电化价通常恒定的金属元素,其价数不必标明;电化价通常仅有两种的金属元素,其价数用亚、(正)、高等词头来标明,和二元化合物 3.1 所规定的一样。

电化价通常不止两种的金属元素,其价数一般用一价、二价、

三价等词头标明,但是为了这些金属元素常见的含氧酸盐名称能够简明起见,特将下述金属元素的某些常见的价数,规定用亚、正、高等词头标明,正字通常均予略去。

锰: 二价为正

稀土金属: 二价为亚,三价为正,四价为高

铂: 二价为亚,四价为正

例: 无变价者:

Na_2CO_3 碳酸钠 AlAsO_4 砷酸铝

ZnCO_3 硫酸锌

通常仅有两种变价者:

Cu_2CO_3 碳酸亚铜 $\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2$ 磷酸亚铁

$\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$ 硝酸铜 $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$ 硫酸铁

PbSO_4 硫酸铅 CoSO_4 硫酸钴

$\text{Pb}(\text{SO}_4)_2$ 硫酸高铅 $\text{Co}_2(\text{SO}_4)_3$ 硫酸高钴

化合价通常不止两种者:

MnSO_4 硫酸锰 $\text{Pt}(\text{SO}_4)_2$ 硫酸铂

$\text{Mn}_2(\text{SO}_4)_3$ 硫酸三价锰或硫酸锰(III)

稀土金属:

$\text{Ce}(\text{SO}_4)_2$ 硫酸高铈 $\text{Ce}_2(\text{SO}_4)_3$ 硫酸铈

SmSO_4 硫酸亚钐

[变价金属的价数也可以在相应的元素名称后加带括号的罗马数字来标明,如上述三种化合物可依次称为: 硫酸铈(IV)、硫酸铈(III)和硫酸钐(II)。]

(II) 酸式盐和碱式盐。酸式盐中的氢用“氢”字表示,羟基盐中的氢氧基用“羟”字表示。氧基盐中的氧用“氧化”表示。“氢”、“羟”、“氧化”等字均置于金属名前,其数目用一、二、三等词头表示,一字通常均予略去。

常见的、在水溶液中稳定的阳离子的氧化金属根,给予下列特定名称;其盐除可按上述氧基盐命名法命名外,尚可按此项特定名称来命名。

氧化金属根的名称如下，其中“一”字可省略，“二”字不可省略。

| | | | |
|---------------------|-------|--------------------|--------|
| HfO^{2+} | 铪氧根 | UO^{2+} | 铀(一)氧根 |
| MoO_2^{3+} | 钼二氧化根 | UO_2^{3+} | 铀二氧化根 |
| SbO^+ | 锑氧根 | VO_2^+ | 钒二氧化根 |
| ThO^{2+} | 钍氧根 | WO^{3+} | 钨氧根 |
| TiO^{2+} | 钛氧根 | ZrO^{3+} | 锆氧根 |

如果金属元素具有不同的氧化数，应该在金属的名称后面用加圆括号的罗马数字标明其氧化数。氧化金属根的电化价，则在其名称的后面用加括号的阿拉伯数；或在其化学符号的右上角用阿拉伯数来标明。例如： MoO^+ 钼(III)氧根(1+)； MoO^{3+} 钼(V)氧根(3+)； UO_2^{3+} 铀(VI)氧根(2+)； UO_2^+ 铀(V)氧根(1+)。

例：酸式盐：

NaH_2PO_4 磷酸二氢钠 Na_2HPO_4 磷酸氢二钠

碱式盐：(1) 氧基盐：

| 化学式 | 一般命名 | 用特定根名命名 |
|-------------------------------|---------|----------|
| BiONO_3 | 硝酸氧化铋 | 硝酸氧铋 |
| $(\text{SbO})_2\text{SO}_4$ | 硫酸二氧化二锑 | 硫酸氧锑 |
| VOSO_4 | 硫酸氧化钒 | 硫酸(二价)氧钒 |
| $(\text{VO}_2)_2\text{SO}_4$ | 硫酸四氧化二钒 | 硫酸双氧钒 |
| $(\text{UO})_2\text{SO}_4$ | 硫酸二氧化二铀 | 硫酸氧铀 |
| $\text{UO}_2(\text{ClO}_4)_2$ | 高氯酸二氧化铀 | 高氯酸双氧铀 |

(2) 羟基盐：

$\text{Cu}(\text{OH})\text{IO}_3$ 碘酸羟铜
 $\text{V}_2(\text{OH})_2(\text{SO}_4)_3$ 硫酸二羟二钒(IV)

复杂的酸式盐和碱式盐，在用上述方法命名时，若根据其他根基的数目可以算出酸根的数目，则通常都略去表示酸根数目的词头，因为几某酸之类的名称容易和同多酸盐的名称相混。

复杂的酸式盐或碱式盐还可以视作分子化合物来命名，将酸

或碱的名称放在前面,盐的名称放在后面,中间用化学介词“合”字连缀来命名。分子的数目用一、二、三等词头来标明,并在名称的后面附上化学式,但是当确定它的结构是属于配位化合物时,则应按配位化合物来命名。

| 化 学 式 | 用氢字命名 | 视作分子化合物 | 类 名 |
|---|--------|--------------|--------|
| 复杂的酸式盐: $\text{KIO}_3 \cdot 2\text{HIO}_3$ $= \text{KH}_2(\text{IO}_3)_3$ | 碘酸二氢钾 | 二(碘酸)合碘酸钾 | 酸式碘酸钾 |
| $4\text{K}_2\text{SO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{SO}_4$ $= \text{K}_2\text{H}_6(\text{SO}_4)_7$ | 硫酸六氢八钾 | 三(硫酸)合四(硫酸钾) | 酸式硫酸钾 |
| $5\text{K}_2\text{SO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{SO}_4$ $= \text{K}_2\text{H}_3(\text{SO}_4)_4$ | 硫酸三氢五钾 | 三(硫酸)合五(硫酸钾) | 酸式硫酸钾 |
| 复杂的碱式盐: $\text{CuCO}_3 \cdot \text{Cu}(\text{OH})_2$ | 碳酸二羟铜 | 氢氧化铜合碳酸铜 | 碱式碳酸铜 |
| $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3 \cdot \text{Al}(\text{OH})_3$ $= \text{Al}(\text{OH})\text{SO}_4$ | 硫酸羟铝 | 氢氧化铝合硫酸铝 | 碱式硫酸铝 |
| $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3 \cdot 4\text{Al}(\text{OH})_3$ $= \text{Al}_2(\text{OH})_4\text{SO}_4$ | 硫酸四羟二铝 | 四(氢氧化铝)合硫酸铝 | 碱式硫酸铝 |
| $\text{SnO} \cdot \text{SnCO}_3$ | 碳酸氧化亚锡 | 氧化亚锡合碳酸亚锡 | 碱式碳酸亚锡 |

(III) 混盐和复盐。混盐和复盐可依照 4.2 的规定命名,当有几个电负性组分同时存在时,在名称中将电负性较强者放在前面;有几个电正性组分同时存在时,在名称中将电正性较弱者放在前面。混盐和复盐也可视作分子化合物来命名,在名称中将分子量较小者放在前面。

例:

$\text{Ca}(\text{OCl})\text{Cl}$ 氯化次氯酸钙 KCaPO_4 磷酸钙钾
 $\text{Ca}(\text{NO}_3)\text{Cl}$ 氯化硝酸钙 NH_4MgPO_4 磷酸镁铵
 KNaCO_3 碳酸钠钾

复盐例:

$\text{KCl} \cdot \text{MgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ 六水合氯化镁氯化钾,俗名光卤石。

6. 同多酸和同多酸盐

6.1 同 多 酸

由两个或两个以上同种简单含氧酸分子缩水而成的酸叫做同多酸,命名方法是:由 r 分子正某酸 H_mXO_n (或原某酸 H_mXO_m) 缩去 q 分子水而成的同多酸,称为“ q 缩 r 某酸”(或 q 缩 r 原某酸)。

焦酸(重酸)也可以说是属于同多酸之列的,但是因为比较简单而常见,所以在简单含氧酸中业已述及。

6.2 同 多 酸 盐

可以有两种命名方法:

(I) 按照同多酸的名称,称为“ q 缩 r 某酸几某”(或 q 缩 r 原某酸几某),因为阳离子数目业已注明,所以 q 缩二字一般均可省去。

(II) 将同多酸盐解析成为酸酐和碱酐的比例来命名,在名称中将酸酐和碱酐的比例用阿拉伯数字表示,写在名前的方括号中,各称为 $[X:Y]$ 某酸某。

兹将硼、硅、钼、钨和钒的一些常见同多酸盐连同其正酸盐或原酸盐列出如附表。

| 实 验 式 | 用数字词头形成的名称 | 解 析 式 | 由酸酐与碱酐比例形成的名称 |
|--------------------|------------------|-----------------------|---------------|
| 硼 酸 盐 | | | |
| $Na_3BO_3^*$ | (正)硼酸钠 | | |
| $Na_4B_2O_7$ | (一缩)二硼酸四钠 | $2Na_2O \cdot B_2O_3$ | $[1:2]$ 硼酸钠 |
| $NaBO_2^*$ | 偏硼酸钠;(一缩)(一)硼酸一钠 | $Na_2O \cdot B_2O_3$ | $[1:1]$ 硼酸钠 |
| $Na_2B_4O_7$ | (五缩)四硼酸二钠 | $Na_2O \cdot 2B_2O_3$ | $[2:1]$ 硼酸钠 |
| NaB_3O_6 | (四缩)三硼酸钠 | $Na_2O \cdot 3B_2O_3$ | $[3:1]$ 硼酸钠 |
| $Na_2B_6O_{13}$ | (十一缩)八硼酸二钠 | $Na_2O \cdot 4B_2O_3$ | $[4:1]$ 硼酸钠 |
| NaB_5O_{10} | (七缩)五硼酸钠 | $Na_2O \cdot 5B_2O_3$ | $[5:1]$ 硼酸钠 |
| $Na_2B_{10}O_{19}$ | (十七缩)十二硼酸二钠 | $Na_2O \cdot 6B_2O_3$ | $[6:1]$ 硼酸钠 |

续 表

| 实 验 式 | 用数字词头形成的名称 | 解 析 式 | 由酸酐与碱酐比例形成的名称 |
|---|----------------|---|---------------|
| 硅 酸 盐 | | | |
| $\text{Na}_2\text{SiO}_3^*$ | (正)硅酸钠 | | |
| $\text{Na}_4\text{SiO}_4^*$ | 原硅酸钠 | | |
| $\text{Na}_6\text{Si}_2\text{O}_7$ | (一缩)二(原)硅酸六钠 | $3\text{Na}_2\text{O} \cdot 2\text{SiO}_2$ | [2:3] 硅酸钠 |
| $\text{Na}_8\text{Si}_3\text{O}_{10}$ | (二缩)三(原)硅酸八钠 | $4\text{Na}_2\text{O} \cdot 3\text{SiO}_2$ | [3:4] 硅酸钠 |
| $\text{Na}_8\text{Si}_4\text{O}_{11}$ | (五缩)四(原)硅酸六钠 | $3\text{Na}_2\text{O} \cdot 4\text{SiO}_2$ | [4:3] 硅酸钠 |
| $\text{Na}_6\text{Si}_3\text{O}_8$ | (四缩)三(原)硅酸四钠 | $2\text{Na}_2\text{O} \cdot 3\text{SiO}_2$ | [3:2] 硅酸钠 |
| $\text{Na}_2\text{Si}_3\text{O}_7$ | (五缩)三(原)硅酸二钠 | $\text{Na}_2\text{O} \cdot 3\text{SiO}_2$ | [3:1] 硅酸钠 |
| 钼 酸 盐 | | | |
| $\text{Na}_2\text{MoO}_4^*$ | 钼酸钠 | | |
| $\text{Na}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ | (一缩)二钼酸二钠 | $\text{Na}_2\text{O} \cdot 2\text{MoO}_3$ | [2:1] 钼酸钠 |
| $\text{Na}_2\text{Mo}_3\text{O}_{10}$ | (二缩)三钼酸二钠 | $\text{Na}_2\text{O} \cdot 3\text{MoO}_3$ | [3:1] 钼酸钠 |
| $\text{Na}_2\text{Mo}_4\text{O}_{13}$ | (三缩)四钼酸二钠 | $\text{Na}_2\text{O} \cdot 4\text{MoO}_3$ | [4:1] 钼酸钠 |
| $\text{Na}_{10}\text{Mo}_{12}\text{O}_{41}$ | (七缩)十二钼酸十钠 | $5\text{Na}_2\text{O} \cdot 12\text{MoO}_3$ | [12:5] 钼酸钠 |
| 钨 酸 盐 | | | |
| Na_2WO_4^* | (正)钨酸钠 | | |
| $\text{Na}_4\text{W}_3\text{O}_{11}$ | (一缩)三钨酸四钠 | $2\text{Na}_2\text{O} \cdot 3\text{WO}_3$ | [3:2] 钨酸钠 |
| $\text{Na}_2\text{W}_2\text{O}_7$ | (一缩)二钨酸二钠 | $\text{Na}_2\text{O} \cdot 2\text{WO}_3$ | [2:1] 钨酸钠 |
| $\text{Na}_2\text{W}_3\text{O}_{10}$ | (二缩)三钨酸二钠 | $\text{Na}_2\text{O} \cdot 3\text{WO}_3$ | [3:1] 钨酸钠 |
| $\text{Na}_2\text{W}_4\text{O}_{13}$ | (三缩)四钨酸二钠 | $\text{Na}_2\text{O} \cdot 4\text{WO}_3$ | [4:1] 钨酸钠 |
| $\text{Na}_2\text{W}_8\text{O}_{25}$ | (七缩)八钨酸二钠 | $\text{Na}_2\text{O} \cdot 8\text{WO}_3$ | [8:1] 钨酸钠 |
| $\text{Na}_{10}\text{W}_{12}\text{O}_{41}$ | (七缩)十二钨酸十钠 | $5\text{Na}_2\text{O} \cdot 12\text{WO}_3$ | [12:5] 钨酸钠 |
| 钒 酸 盐 | | | |
| Na_3VO_4^* | (正)钒酸钠 | | |
| $\text{Na}_4\text{V}_2\text{O}_7$ | 焦钒酸钠;(一缩)二钒酸四钠 | $2\text{Na}_2\text{O} \cdot \text{V}_2\text{O}_5$ | [1:2] 钒酸钠 |
| NaVO_3^* | 偏钒酸钠;一缩钒酸钠 | $\text{Na}_2\text{O} \cdot \text{V}_2\text{O}_5$ | [1:1] 钒酸钠 |
| $\text{Na}_2\text{V}_4\text{O}_{11}$ | (五缩)四钒酸二钠 | $\text{Na}_2\text{O} \cdot 2\text{V}_2\text{O}_5$ | [2:1] 钒酸钠 |
| $\text{Na}_3\text{V}_3\text{O}_8$ | (四缩)三钒酸钠 | $\text{Na}_2\text{O} \cdot 3\text{V}_2\text{O}_5$ | [3:1] 钒酸钠 |

* 正酸盐、偏酸盐或原酸盐不是多酸盐,在此列出只是为了对照参阅之用。

7. 杂多酸和杂多酸盐

7.1 杂 多 酸

杂多酸可以有两种命名方法,即:

(I) 将杂多酸解析为水、成酸金属的氧化物及非金属或两性金属所成的酸,并按此来命名。命名方法是:用中文数字将各项比例写在元素名前,其水的部分视作水合物来命名。

(II) 将杂多酸解析为水、成酸金属的氧化物及非金属或两性金属的氧化物,按此来命名,并用阿拉伯数字在名前记出其数目比例。

两者比较,(II)法较好,常见的杂多酸所含的水分子数及各项氧化物组分的数目比例通常均予略去。

例:

| | |
|--|---------------|
| $2\text{H}_3\text{SbO}_4 \cdot 5\text{WO}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ | 一水合五钨二锑酸 |
| 或 $\text{Sb}_2\text{O}_5 \cdot 5\text{WO}_3 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ | 4:5:1 水合钨锑酸 |
| | 简称: 钨锑酸 |
| $\text{H}_3\text{PO}_4 \cdot 12\text{MoO}_3 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$ | 十二水合十二钼磷酸 |
| 或 $\text{P}_2\text{O}_5 \cdot 24\text{MoO}_3 \cdot 27\text{H}_2\text{O}$ | 27:24:1 水合钼磷酸 |
| | 简称: 钼磷酸 |

7.2 杂 多 酸 盐

杂多酸盐,按上所述,也可以有两种名称,即:

(I) 解析成为水、成酸金属的氧化物及非金属元素酸的盐或两性金属元素酸的盐,加上中文数字词头来命名。

(II) 解析成为水、成酸金属的氧化物,非金属或两性金属的氧化物及成碱金属元素的氧化物,并用阿拉伯数字标明组成比例来命名。

两者比较,(II)法较好,常见的杂多酸盐,其所含的水分子数及各项组分的数目比例通常均予略去。

当杂多酸或杂多酸盐名称过于冗长时，最好还用化学式而不用名称。

例：

| | |
|---|----------------|
| $2K_2WO_4 \cdot 4MoO_3 \cdot 12H_2O$ | 十二水合四钼二钨酸钾 |
| 或 $2K_2O \cdot 2WO_3 \cdot 4MoO_3 \cdot 12H_2O$ | 12:4:2:2水合钼钨酸钾 |
| | 简称：钼钨酸钾 |
| $M_3PO_4 \cdot 12MoO_3$ | 十二钼磷酸 M |
| 或 $3M_2O \cdot 2P_2O_5 \cdot 24MoO_3$ | 24:2:3 钼磷酸 M |
| | 简称：钼磷酸 M |
| $M_3SiO_6 \cdot 12WO_3$ | 十二钨硅酸 M |
| 或 $4M_2O \cdot SiO_2 \cdot 12WO_3$ | 12:1:4 钨硅酸 M |
| | 简称：钨硅酸 M |

8. 加成化合物

对于一些结构尚未确定的加成化合物，避免过去使用过的在组成它的各化合物名称之间加连缀词“合”字的办法来命名它，而是在各组成化合物名称之间加中圆点“·”来命名它，并且在名称的最后用加括号的阿拉伯数码来表示各组成化合物的分子数。当这种加成化合物的结构一旦确定之后，就应该按照配位化合物的命名规则来命名。

例：

| | |
|---|-------------------|
| $3CdSO_4 \cdot 8H_2O$ | 硫酸镉·水(3/8) |
| $Na_2CO_3 \cdot 10H_2O$ | 碳酸钠·水(1/10) |
| | 或：十水合碳酸钠 |
| $K_2SO_4 \cdot Al_2(SO_4)_3 \cdot 24H_2O$ | 硫酸钾·硫酸铝·水(1/1/24) |
| | 或：钾铝矾 |
| $CaCl_2 \cdot 8NH_3$ | 氯化钙·氨(1/8) |
| $AlCl_3 \cdot 4C_2H_5OH$ | 氯化铝·乙醇(1/4) |

| | |
|---|--------------------|
| $\text{NH}_3 \cdot \text{BF}_3$ | 氨·三氟化硼(1/1) |
| $\text{BiCl}_3 \cdot 3\text{PCl}_5$ | 三氯化铋·五氯化磷(1/3) |
| 笼形化合物: | |
| $8\text{H}_2\text{S} \cdot 46\text{H}_2\text{O}$ | 硫化氢·水(8/46) |
| $8\text{Kr} \cdot 46\text{H}_2\text{O}$ | 氙·水(8/46) |
| $6\text{Br}_2 \cdot 46\text{H}_2\text{O}$ | 溴·水(6/46) |
| $8\text{CHCl}_3 \cdot 16\text{H}_2\text{S} \cdot 136\text{H}_2\text{O}$ | 氯仿·硫化氢·水(8/16/136) |
| $\text{C}_6\text{H}_6 \cdot \text{NH}_3 \cdot \text{Ni}(\text{CN})_2$ | 氨·苯·氰化镍(1/1/1) |

9. 硼 化 合 物

凡含硼的化合物都用“硼-”或“-硼”字来标明；硼和氢的化合物都用“硼氢-”或“-硼烷”来标明；含硼阴离子都用“硼酸根”来标明。

9.1 二元硼化合物

二元硼化物按一般无机化合物命名法、依相化合元素的相对电负性,叫做“某化硼”或“硼化某”。

例:

- | | |
|---------------------------|-------|
| 1. BCl_3 | 三氯化硼 |
| 2. B_2F_4 | 四氟化二硼 |
| 3. B_2O_3 | 三氧化二硼 |
| 4. TiB_2 | 二硼化钛 |
| 5. AlB_{12} | 十二硼化铝 |
| 6. CaB_6 | 六硼化钙 |

9.2 硼氢化合物

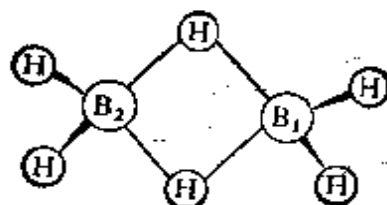
9.21 硼氢化合物统称为硼烷,硼原子数少于10个的用干支来表示硼原子数,硼原子数超过10时,则用中文数字词头来标明硼原子数。分子中的氢原子数则用阿拉伯数字加圆括号直接写

在化合物名称的后面。

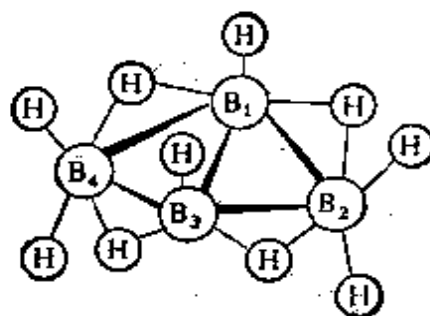
例：

1. BH_3 甲硼烷(3)*

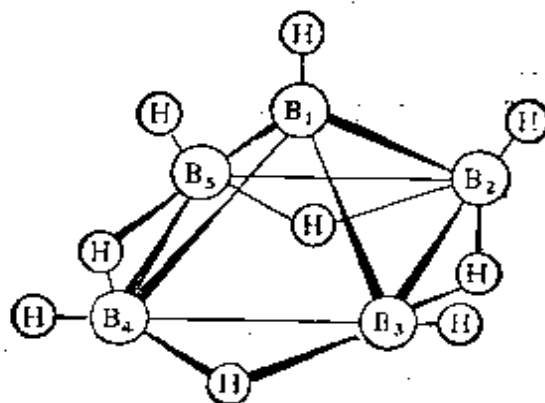
2. B_2H_6 乙硼烷(6)



3. B_4H_{10} 丁硼烷(10)

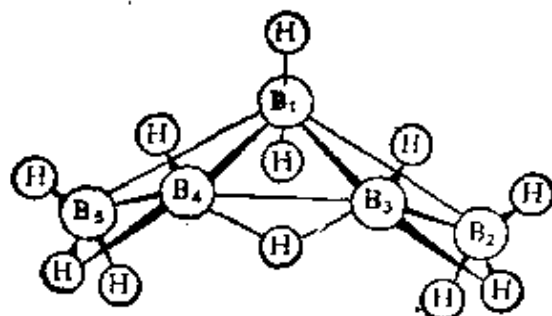


4. B_5H_9 戊硼烷(9)

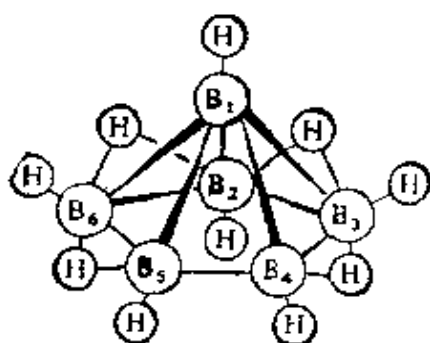


* 这个化合物不独立存在。

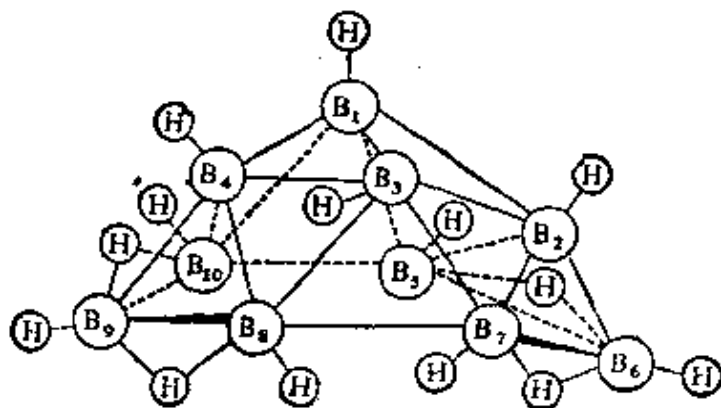
5. B_5H_{11} 戊硼烷 (11)



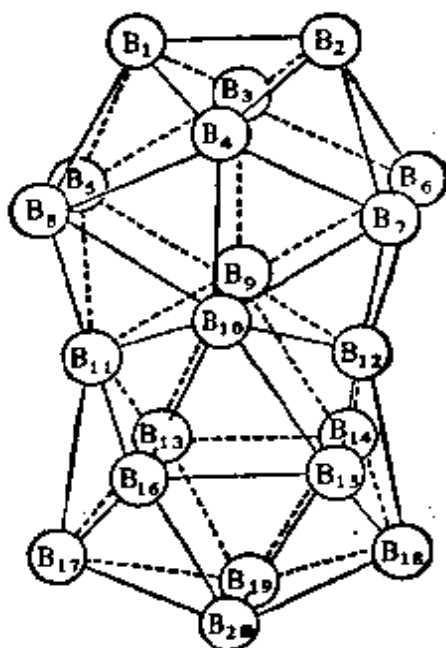
6. B_6H_{10} 己硼烷 (10)



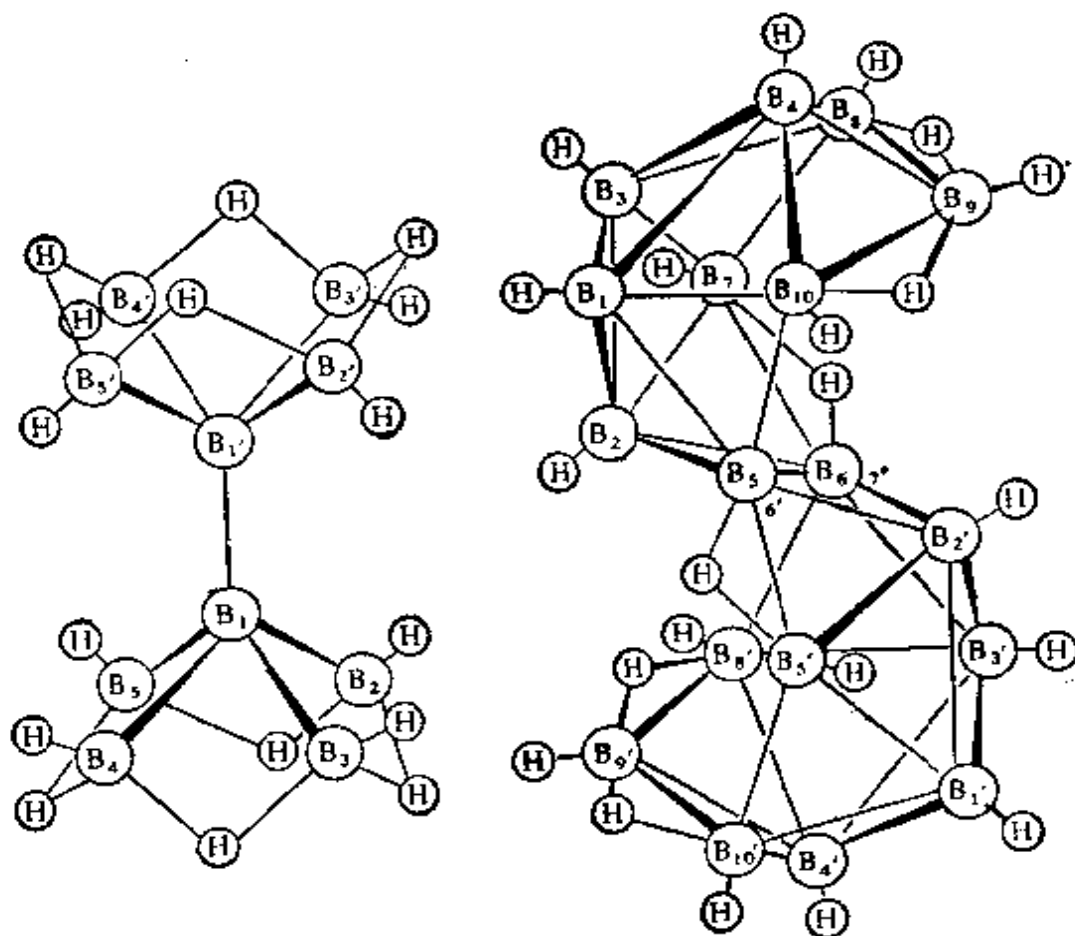
7. $B_{10}H_{14}$ 癸硼烷 (14)



8. $B_{20}H_{16}$ 二十硼烷 (16)



除腰部熔合起来的 4 个硼原子外,其他每个硼原子上有一个端稍氢原子



在实际工作中,有如甲硼烷 BH_3 和乙硼烷 B_2H_6 的情况中,如果不标出氢原子数也不致引起混淆的话,也可以把氢原子数略去。

9.22 集合、耦合硼烷 由简单硼烷以单键或耦合边连在一起而形成的复杂硼烷可以看作是简单硼烷的衍生物而加以命名。

例:

1. $\text{B}_{10}\text{H}_{16}$

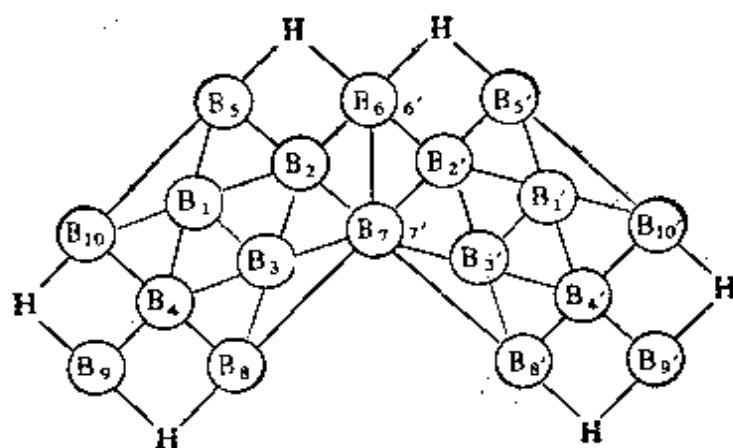
1,1'-联戊硼烷(9) (见 27 页左下图)

2. $\text{B}_{18}\text{H}_{22}$

癸硼烷(14)并[6', 7':5, 6] 癸硼烷(14) (见 27 页右下图,编号方法参见 9.332)

3. 异- $\text{B}_{18}\text{H}_{22}$

癸硼烷(14)并[6', 7':6, 7] 癸硼烷(14) (编号方法参见 9.332)



9.23 多硼烷及衍生物按结构可分为两大类: (1) 闭合的具有三角棱面的多面体骨架结构的硼烷,在名称前面标以“闭式-”词头(笼形)。(2) 比多面体结构缺少一个或多个硼原子而形成的开口骨架结构,在名称前面标以“开式-”词头(巢形或网形)。

例:

1. $\text{B}_{20}\text{H}_{16}$ 闭式-二十硼烷(16)

2. $\text{B}_{10}\text{H}_{14}$ 开式-癸硼烷(14)

9.3 硼烷的衍生物

9.31 单个硼原子的化合物都可以看成是甲硼烷的衍生物。

例:

1. BHCl_2 二氯(代)甲硼烷
2. BBr_2F 一氟二溴(代)甲硼烷
3. $\text{B}(\text{OH})_3$ 三羟基(代)甲硼烷(硼酸)
4. $\text{B}(\text{CH}_3)_2\text{OH}$ 一羟基二甲基(代)甲硼烷
5. $\text{BCl}(\text{OCH}_3)_2$ 一氯二甲氧基(代)甲硼烷

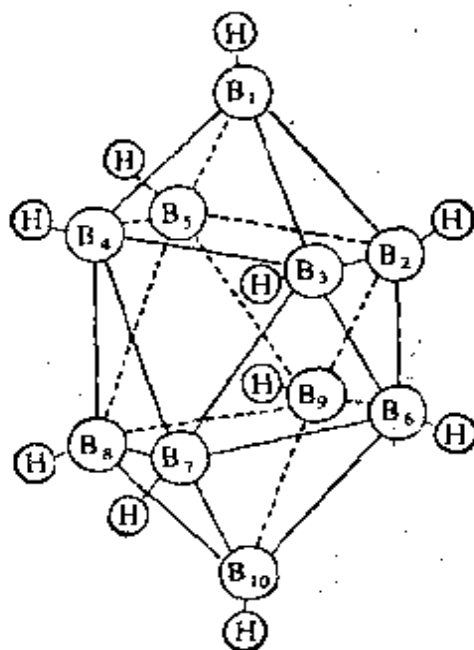
9.32 多硼烷中氢原子被其他原子或基团取代时, 按照有机化合物命名法则来命名, 但应保留母体硼烷表示氢原子数的词尾数字。

例:

1. B_2Br_4 四溴化二硼或四溴(代)乙硼烷(4)
2. B_8Cl_8 八氯(代)辛硼烷(8)
3. $\text{B}_2\text{H}_5\text{Cl}$ 一氯(代)乙硼烷(6)
4. $\text{B}_{10}\text{H}_4\text{I}_{16}$ 十碘(代)癸硼烷(14)

9.33 硼烷及衍生物的编号法则

硼烷及衍生物的骨架原子位次的编号一般都依照有机物命名



法的规定习惯,附加的法则介绍在以下各规定中。

9.331 闭式硼骨架的编号

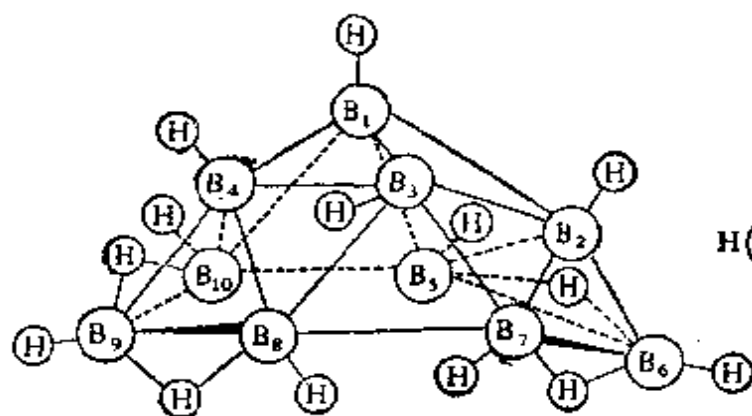
选择与闭式硼烷中依次多硼原子平面相垂直的一条最长的最高级对称轴,从轴上最高位置的一个硼原子开始编号,从上而下,绕轴依顺时针方向给各平面上的硼原子编号。

$B_{10}H_{12}^-$ 十氢闭式-十硼酸根(2-)离子的骨架硼原子编号
(见 29 页图)

9.332 开式-硼骨架的编号

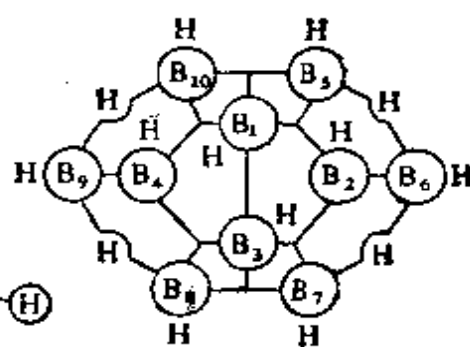
把开式-硼骨架从骨架开口部分向下俯视投影在一个平面上。从投影图的内区原子中选定一个处在 12 点钟位置的原子开始,按顺时针方向进行编号,然后接着对外围的原子按顺时针方向编号。

$B_{10}H_{14}$ 骨架硼原子的编号



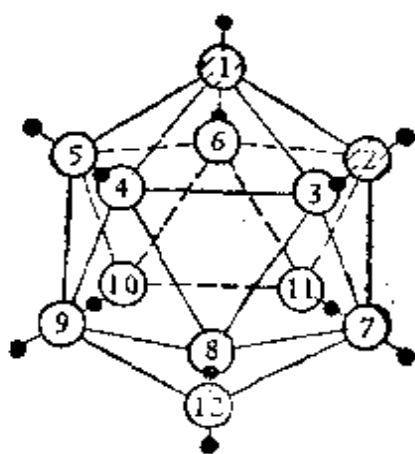
$B_{10}H_{14}$

$B_{10}H_{14}$



平面投影和编号

9.333 对于硼骨架中有取代杂原子的化合物把杂原子的编

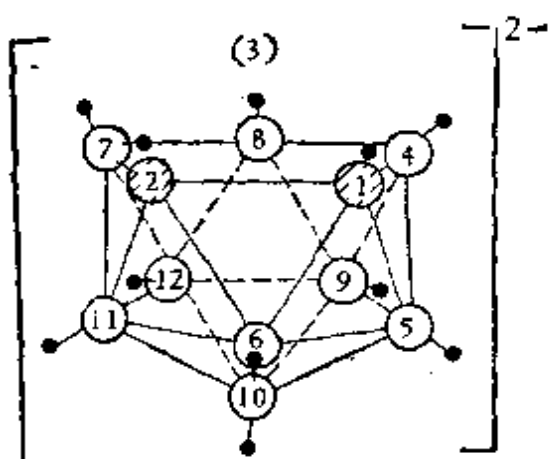


号定为最低数。

闭式-1, 2- $B_{10}C_2H_{12}$ 的编号(见 30 页下图)。

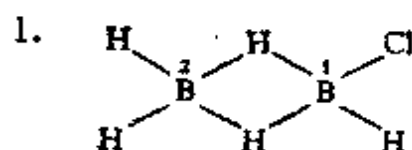
9.334 比闭式多面体骨架只少一个硼原子的化合物可按闭合骨架编号,在正常情况下可以给短缺的那个硼原子靠后编号,并加括号,表示这个位置是空缺的,或标以“脱硼”字样。

开式-(3), 1, 2- $B_9C_2H_{11}^{2-}$ 或开式-3-脱硼-1, 2- $B_9C_2H_{11}^{2-}$

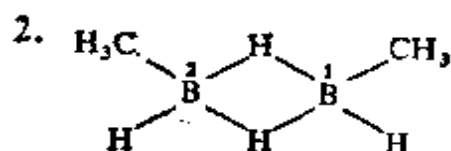


9.34 含取代基的硼烷衍生物的编号命名,用尽可能小的数字给有取代基的硼原子编号,将取代位置的编号和取代基一起作为词头,连接在母体化合物名称的前面。

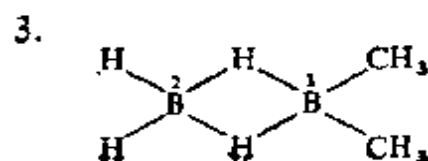
例:



1-氯代乙硼烷(6)

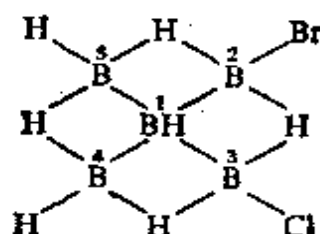


1, 2-二甲基乙硼烷(6)



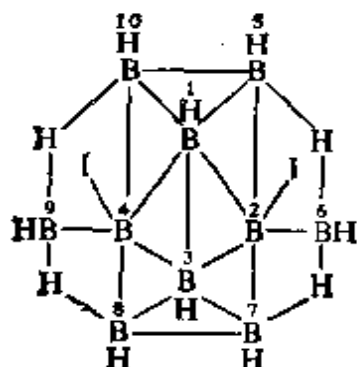
1, 1-二甲基乙硼烷(6)

4.



2-溴-3-氯代戊硼烷 (9)

5.

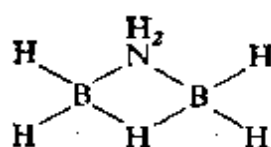


2, 4-二碘代癸硼烷 (14)

9.35 取代基取代成桥氢原子所形成的硼烷衍生物，仿照多核化合物的命名法则，在成桥取代基名称之前，冠以符号“ μ -”字作为字首，必要时用硼原子编号来标明成桥位置。与取代位置编号一样，用尽可能低的数字来标明成桥位置，氢桥则不须专门标明。

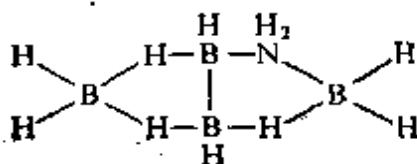
例：

1.



μ -氨基乙硼烷 (6)

2.



1, 2- μ -氨基丁硼烷 (10)

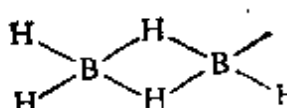
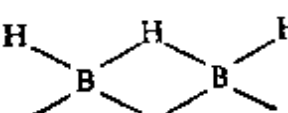
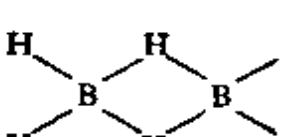
9.4 含硼基团

9.41 从甲硼烷导出的基团，可以叫做甲硼烷基，或简称甲硼基，可同时叫出与硼原子相连接的基团的名称。

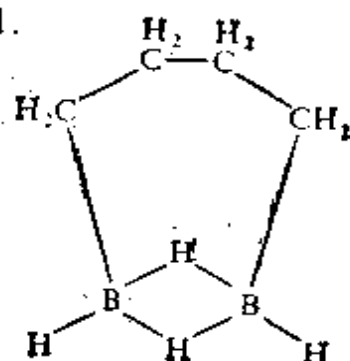
例：

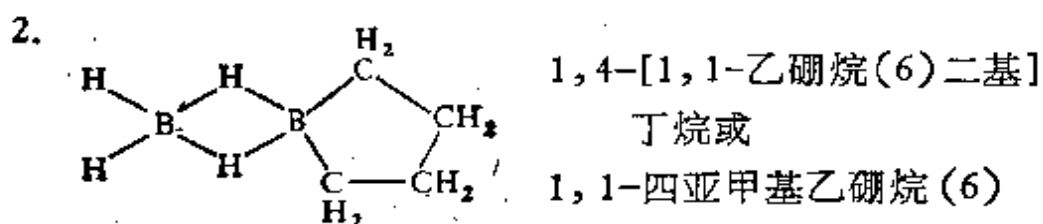
- | | |
|--|-------------|
| 1. $\text{H}_2\text{B}-$ | 甲硼基或二氢硼基 |
| 2. $\text{Cl}_2\text{B}-$ | 二氯代甲硼基或二氯硼基 |
| 3. $(\text{CH}_3)_2\text{B}-$ | 二甲基甲硼基 |
| 4. $(\text{HO})_2\text{B}-$ | 二羟基甲硼基或二羟硼基 |
| 5. $\text{OB}-$ | 氧硼基 |
| 6. $\text{HB} \begin{smallmatrix} \diagup \\ \diagdown \end{smallmatrix}$ | 亚甲硼基 |
| 7. $\text{CH}_3-\text{B} \begin{smallmatrix} \diagup \\ \diagdown \end{smallmatrix}$ | 甲基亚甲硼基或甲基硼基 |
| 8. $\text{B} \begin{smallmatrix} \diagup \\ \diagdown \end{smallmatrix}$ | 次甲硼基或简称硼基 |

9.42 由二个或多个硼原子生成的硼氢化合物脱除端梢氢原子而导出的基团命名如下。

- | | | |
|----|---|---------------|
| 1. |  | 乙硼烷(6)基 |
| 2. |  | 1,2-乙硼烷(6)二基 |
| 3. |  | 1,1-乙硼烷(6)二基 |
| 4. | $-\text{B}_{10}\text{H}_{12}-$ | 6,9-癸硼烷(14)二基 |

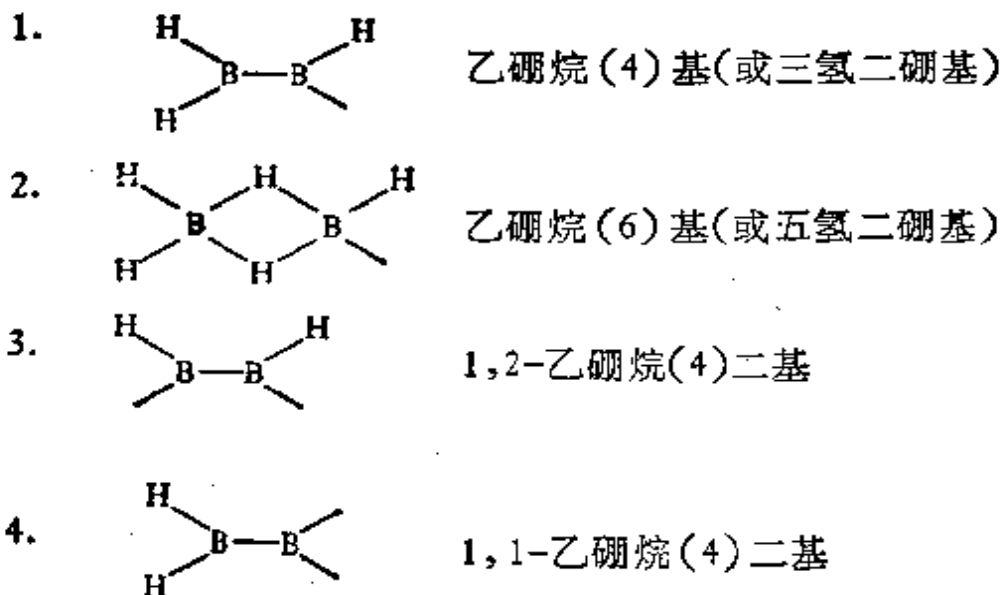
例:

- | | | |
|----|---|---|
| 1. |  | 1,4-[1,2-乙硼烷(6)二基] 丁烷或 1,2-四亚甲基乙硼烷(6) |
|----|---|---|



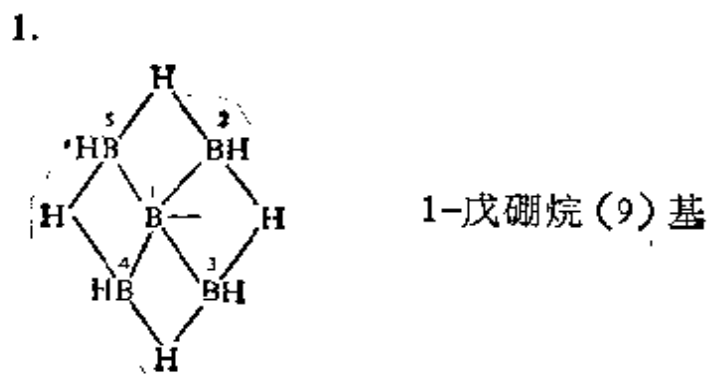
9.421 由相同数目硼原子但不同数目氢原子的几种硼氢化物导出的基团，可用括号中的阿拉伯数字来标明母体硼烷中的氢原子数，也可以用中文数字标明基团中含有的氢原子数。

例：

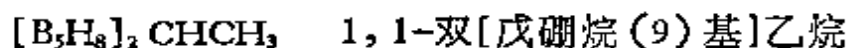


9.422 基团联接点所在位置应给以尽可能小的编号，并在基团名称前面标上相应的编号或符号。

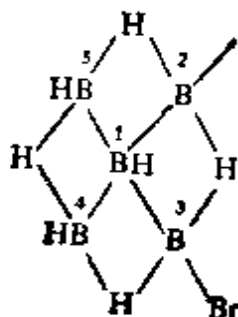
例：



2.



3.



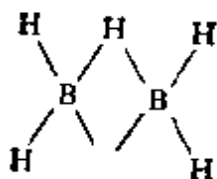
3-溴代-2-戊硼烷(9)基

9.43 脱除桥氢而形成的基团

按照 9.42 节的规定给这些基团命名,并用数字标出成桥原子来表明成桥位置上的连接点,把两个数字用半字线连接起来放在括号中。

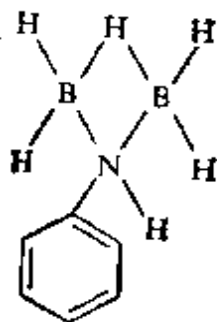
例:

1.



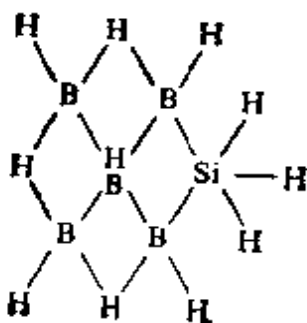
(1-2)乙硼烷(6)二基

2.



N-(1-2)乙硼烷基苯胺或
 μ -苯胺基乙硼烷(6)

3.



(2-3)戊硼烷(9)基甲基硅烷
或 μ -甲基硅基戊硼烷(9)

9.5 与硼氢化合物有关的离子

9.51 含硼离子和它们的盐可按照配位化合物的命名规则来命名。

例:

- | | |
|--|-------------------------|
| 1. NaBF_4 | 四氟硼酸钠 |
| 2. LiBH_4 | 四氢硼酸锂 |
| 3. $\text{Th}(\text{BH}_4)_3$ | 三(四氢硼酸)钍或 四氢硼酸钍(III) |
| 4. $\text{NH}_4[\text{B}(\text{C}_6\text{H}_5)_4]$ | 四苯基硼酸铵 |
| 5. $[(\text{CH}_3)_4\text{N}][\text{BCl}_4]$ | 四氯硼酸四甲基铵 |

如果不致造成混淆的话,可以把字首“四”字略去。

例:

- | | |
|--------------------|-----------|
| 6. NaBF_4 | 氟硼酸钠 |
| 7. LiBH_4 | 氢硼酸锂,硼氢化锂 |

9.52 离子的电荷可以表示在相应离子后面附加的括号里。

例:

- | | |
|---|--------------------------|
| 1. $\text{Na}[\text{BH}_3\text{CN}]$ | 氰基三氢硼酸(1-)钠 |
| 2. $\text{Ca}[\text{B}(\text{CH}_3)_2\text{H}]$ | 一氢二甲基硼酸(2-)钙 |
| 3. $[\text{BH}_2(\text{NH}_3)_2]\text{Cl}$ | 氯化[二氨二氢合硼(1+)] |
| 4. $[\text{Re}(\text{H}_3\text{B})_2(\text{CO})_5]^-$ | 双(甲硼烷)五羰基合铼酸 根(1-)离子 |
| 5. $\text{Na}[\text{BH}_3\text{CONH}_2]$ | 氨基甲酰基三氢硼酸(1-)钠 |

9.53 离子型的多硼多氢化合物可按单核化合物命名,多硼多氧化合物(多硼酸盐)可按单核化合物命名,也可按同多阴离子命名。电中性的衍生物可按本系统或加成化合物命名

例:

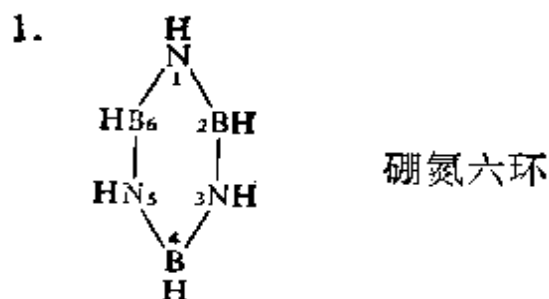
- | | |
|--|--------------|
| 1. $\text{Na}[\text{B}_2\text{H}_7]$ | 七氢二硼酸(1-)钠 |
| 2. $\text{Na}_2[\text{B}_2(\text{C}_6\text{H}_5)_6]$ | 六苯基二硼酸(2-)钠 |
| 3. $\text{Ca}[\text{B}_3\text{H}_8]_2$ | 八氢三硼酸(1-)钙 |

| | |
|---|---------------------------|
| 4. $\text{Na}[\text{B}_9\text{H}_{14}]$ | 十四氢九硼酸(1-)-钠 |
| 5. $\text{Na}_2[\text{B}_{10}\text{Cl}_{10}]$ | 十氯十硼酸(2-)-钠 |
| 6. $\text{Na}_2[\text{B}_{10}\text{H}_{10}]$ | 十氢十硼酸(2-)-钠 |
| 7. $\text{Na}[\text{B}_{10}\text{H}_9\text{NI}_3]$ | 一碘九氢十硼酸(1-)-钠 |
| 8. $\text{B}_{10}\text{H}_8(\text{NIH}_3)_2$ | 二碘八氢合十硼或二碘 合癸硼烷(8) |
| 9. $[\text{B}_{10}\text{H}_7(\text{NH}_3)_3]^+$ | 三氨七氢合十硼(1+)-离子 |
| 10. $[\text{B}_{10}\text{H}_8(\text{COOH})_2]^{2-}$ | 二羧基八氢十硼酸根(2-)-离子 |
| 11. $\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7$ | 七氧四硼酸(2-)-钠或 四硼酸(2-)-钠 |

9.6 无机硼杂环化合物

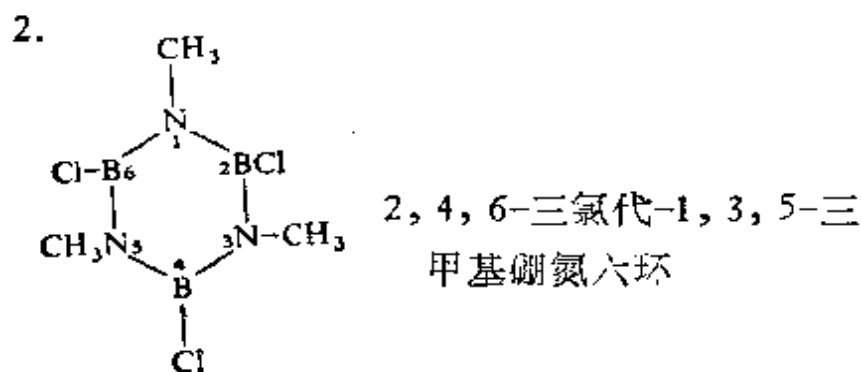
有一些含硼的成环系统,往往是由硼和第 V 族或第 VI 族元素交替组成的稳定杂环系统和它们的衍生物。这些化合物常采用它们的通用名称。

例:

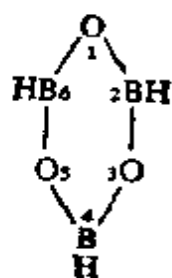


环中的编号顺序完全依照有机杂环命名法。

例:

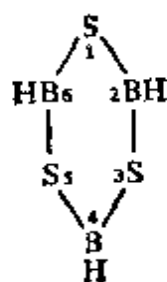


3.



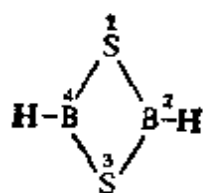
间硼氧六环(三硼三氧环)

4.



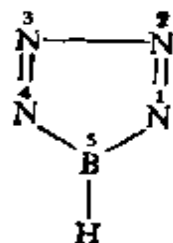
间硼硫六环(三硼三硫环)

5.



1, 3, 2, 4-二硫二硼环

6.



四氮一硼五环

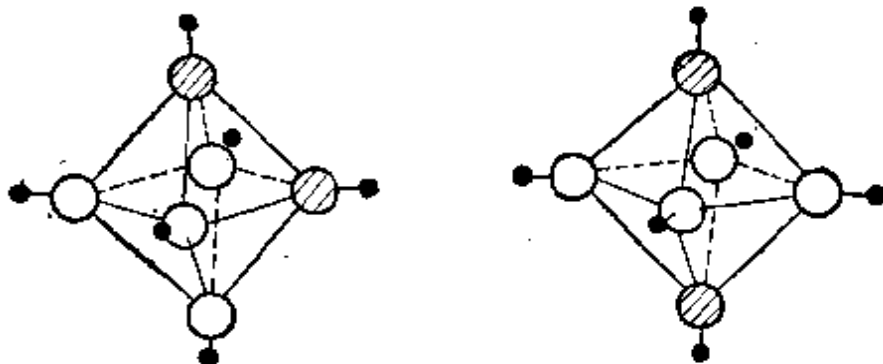
9.7 骨架杂原子取代的硼烷

9.71 硼烷骨架结构上的硼原子可以被氮、磷、砷、硫等原子按照等电子结构原则所取代,生成许多杂原子骨架取代的杂硼烷。这一大类化合物按有机取代命名法来命名,例如碳代硼烷、氮代硼烷、磷代硼烷、硫代硼烷等。在命名中认为一个硼原子被一个杂原子所取代而不管其价态如何。例如 $B_{10}C_2H_{12}$ (碳硼烷)是一个很稳定的化合物,它有很多衍生物。命名时把它看成是一个未知母体硼烷 $B_{12}H_{12}$ 的二碳代衍生物,所以叫做二碳代十二硼烷(12)。它是 $[B_{12}H_{12}]^{2-}$ 阴离子的等电子体,所以也看成是 $[B_{12}H_{12}]^{2-}$ 的取代

用词头“闭式-”和“开式-”来标明闭式和开式网格结构。杂原子尽可能给以最小编号。

“碳硼烷”这个术语有两个含义：(1)它代表碳代硼烷这一类化合物的类名。(2)它又是 $B_{10}C_2H_{12}$ 这个化合物的通用名(参见 9.333)。它的异构体可依碳原子的相对位置，分别叫做邻-、间-、对-碳硼烷。

1. $B_3C_2H_5$ 二碳代-闭式-戊硼烷(5)
2. $B_4C_2H_6$ 1,2-二碳代-闭式-己硼烷(6)
3. $B_4C_3H_6$ 1,6-二碳代-闭式-己硼烷(6)



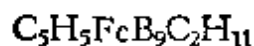
- | | | |
|----------------------|------------------------|-------|
| 4. B_5CH_7 | 碳代-闭式-己硼烷 (7) | } 异构体 |
| 5. $B_4C_2H_8$ | 2, 3-二碳代-开式-己硼烷 (8) | |
| 6. $B_{10}C_2H_{12}$ | 1, 2-二碳代-闭式-十二硼烷 (12) | |
| | 1, 7-二碳代-闭式-十二硼烷 (12) | |
| | 1, 12-二碳代-闭式-十二硼烷 (12) | |

| | |
|---------------------|-----------------------|
| 7. $B_{11}PH_{12}$ | 磷代-闭式-十二硼烷 (12) |
| 8. $B_{10}CPH_{11}$ | 1-磷代-2-碳代-闭式十二硼烷 (11) |
| 9. $B_{10}SH_{12}$ | 7-硫代-开式-十一硼烷 (12) |

• 39 •

名。也可以把这类化合物(金属硼烷、金属碳硼烷)看成是一种开式配体同金属离子生成的配位化合物而加以命名。

例:



3- π -环戊二烯基-1, 2-二碳代-3-铁代-闭式-十二硼烷(12)

或 π -环戊二烯基- π -[十一氢-7, 8-二碳代-开式-十一硼烷基(2-)]合铁(III)

9.73 当一个金属原子被两个硼烷笼体共用时, 可以采用词头“共-”字来表明相互的结构关系。

例: $(\text{B}_7\text{C}_2\text{H}_{11})_2\text{Ni}$

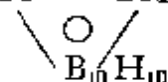
3, 3'-共-双[1, 2-二碳代-3-镍代-闭式-癸硼烷(11)]

或 π -双[1, 2-二碳代-开式-壬硼烷(11)(1-)]合镍(II)

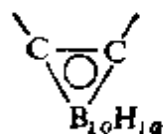
9.74 由杂硼烷衍生的基团的命名法同 9.4。

例:

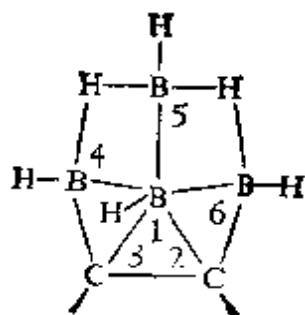
1. $\text{B}_{10}\text{C}_2\text{H}_{12}$ 的结构式简写为 $\text{HC} \text{---} \text{CH}$, 式中的三角形代表



闭式笼体, 小圆圈代表不定域电子体系, 由它导出的基团如:



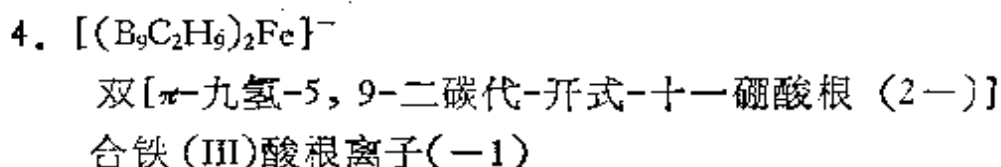
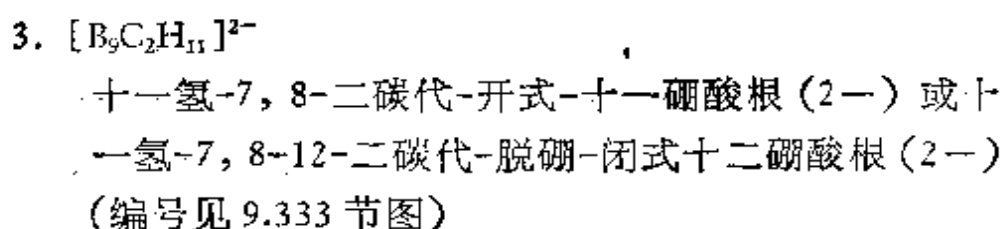
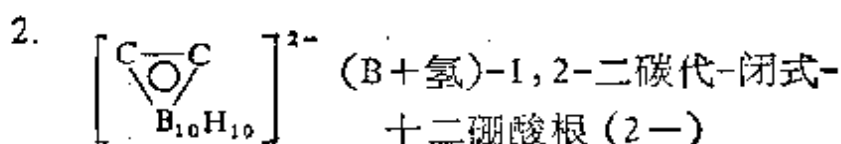
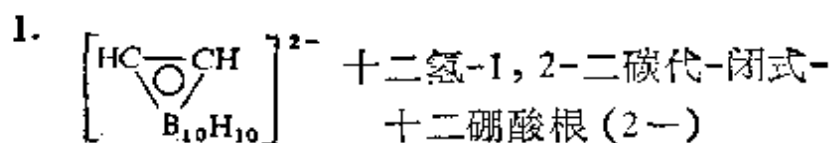
1, 2-二碳代-闭式-十二硼烷-1, 2-二基



2, 3-二碳代-开式-己硼烷(7)-2, 3-二基

9.75 从杂硼烷衍生的离子按 9.5 命名。

例:



9.8 加成化合物

硼化合物中的硼原子往往是电子对接受体而能同给予体生成很多加成化合物。这些化合物可按加成化合物命名。

9.81 用中圆点“·”把给予体和接受体的名称联结起来，如有水分子参加，把水放在最后面。硼烷母体中的氢原子数(已知的或假定的)可用阿拉伯数字照常规表示出来。

例:

- | | |
|--|-----------------------|
| 1. $(\text{CH}_3)_3\text{N} \cdot \text{BH}_3$ | 三甲胺·甲硼烷 |
| 2. $(\text{CH}_3)_3\text{N} \cdot \text{B}_3\text{H}_7$ | 三甲胺·丙硼烷(7) |
| 3. $2\text{NH}_3 \cdot \text{B}_{12}\text{H}_{10}$ | 二氨·十二硼烷(10) |
| 4. $2\text{C}_2\text{H}_5\text{NH}_2 \cdot \text{B}_5\text{H}_9$ | 双(乙胺)·戊硼烷(9) |
| 5. $2(\text{CH}_3)_2\text{S} \cdot \text{B}_{10}\text{Cl}_6\text{H}_2$ | 双(二甲硫醚)·六氯代 癸硼烷(8) |
| 6. $\text{BF}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ | 三氟化硼二水合物 |

7. $\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ 四硼酸二钠十水合物

9.82 为了表示出配体同硼原子的联结方式,可以用一个括号代替半字线,在括号中列出两个相连原子的符号并联以直线。

例:

- | | |
|---|---|
| 1. $\text{OC} \cdot \text{BH}_3$ | 一氧化碳 ($\text{C}-\text{B}$) 甲硼烷 |
| 2. $(\text{CH}_3)_3\text{N} \cdot \text{BH}_2\text{NH}_2$ | 三甲胺 ($\text{N}-\text{B}$) 氨基甲硼烷 |
| 3. $\text{CH}_3\text{ONH}_2 \cdot \text{BH}_3$ | O-甲基羟胺 ($\text{N}-\text{B}$) 甲硼烷 |
| 4. $(\text{C}_5\text{H}_5)_2\text{H}_2\text{W} \cdot \text{BF}_3$ | 二(环戊二烯基)二氢 合钨 ($\text{W}-\text{B}$) 三氟化硼 |
| 5. $\text{CH}_3\text{NH}_2 \cdot \text{B}_{10}\text{CH}_{12}$ | 甲胺 ($\text{N}-\text{C}$)-7-一碳代- 开式-十一硼烷 (12) |

10. 配位化合物

10.1 定义和总则

10.11 定义

配位化合物(简称配合物)是由可以给出孤对电子或多个不定域电子的一定数目的离子或分子(称为配体)和具有接受孤对电子或多个不定域电子的空位的原子或离子(统称中心原子)按一定的组成和空间构型所形成的化合物。这种由一定数目的配体结合在中心原子周围所形成的配位个体可以是中性分子,也可以是带电荷的离子。中性配位个体就是配合物、带电荷的配位个体称配离子,带正电荷的配离子称配阳离子,带负电荷的称配阴离子。含有配离子的化合物统称配合物。与中心原子直接相连的原子叫配位原子。只含有一个配位原子的配体叫单齿配体。配体可能配位的原子的数目,用单齿、二齿、三齿等表示。一个多齿配体通过两个或两个以上的配位原子与一个中心原子连接的称为整合配体或螯合剂。连接于一个以上中心原子的配体,称为桥联基团(简称桥基)。中心原子可以桥基连接,也可以互相直接连接。中心原子连接的数目,用单核、双核、三核、四核等表示。

10.12 命名总则

对配位个体命名时,配体名称列在中心原子之前,不同配体名称之间以中圆点(·)分开,在最后一个配体名称之后缀以“合”字。若配合物为配离子化合物,则命名时阴离子在前,阳离子在后,与无机盐的命名一样。若为配阴离子的化合物,则在配阴离子与外界阳离子之间用“酸”字连接,若外界为氢离子,则在配阴离子之后缀以“酸”字。

例:

- | | |
|----------------------------|---------------------------------|
| 1. $K[PtCl_3NH_3]$ | 三氯·氨合铂酸(1—)钾 三氯·氨合铂(II)酸钾 |
| 2. $[Co(NH_3)_5H_2O]Cl_3$ | 三氯化五氨·水合钴(3+) 三氯化五氨·水合钴(III) |
| 3. $[Co(N_3)(NH_3)_5]SO_4$ | 硫酸叠氮·五氨合钴(2+) 硫酸叠氮·五氨合钴(III) |

10.2 一般配位化合物的化学式和命名

10.21 中心原子

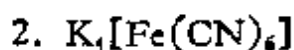
在配位个体的化学式中,应首先列出中心原子的符号(结构式除外),再列出阴离子和中性配体,将整个配位个体的化学式括在方括号[]中。在括号中同类配体的次序,以配位原子元素符号的英文字母次序为准。名称中括号套列次序是{ [()] }。如果括号套列次序有重复时如[[()]],可采用[{ () }]以免混淆。

10.22 中心原子氧化数表示法

对配位个体命名时,必须在中心原子之后用带括号的罗马数字(I)、(II)等表示中心原子的氧化数。或用带圆括号的阿拉伯数字如(1—)或(1+)表示配离子的电荷数。数字后的正负号表示配离子电荷的正负。此外还可使用计量词头来表示组分的比例。

例:

- | | |
|--------------------|------------|
| 1. $K_3[Fe(CN)_6]$ | 六氰合铁酸(3—)钾 |
|--------------------|------------|



六氰合铁(III)酸钾

六氰合铁酸三钾

六氰合铁酸(4-)-钾

六氰合铁(II)酸钾

六氰合铁酸四钾

10.23 词头

10.231 结构词头

在化学式和名称中配位个体的结构情况用词头表示,如反式-、顺式-、面式-、经式-等。

10.232 倍数词头

(1) 在配合物中配体个数用倍数词头二、三、四等数字表示。对于较复杂的配体名称,倍数词头所标的配体则写在括号中,以避免混淆。读时在数词后加“个”字。

例:



读作: 三氯化三个乙二胺合铁(III)



顺-二氯·二(三苯基膦)合铂(II)

读作: 顺式二氯两个三苯基膦合铂(II)

(2) 常见的仅含有一种配体的配阴离子,可以将其倍数词头省略,并将“合”字也略去,作为简化名称。

| 分子式 | 系统名 | 简名 |
|---------------|-------------|-----------|
| $H_2[SiF_6]$ | 六氟合硅酸 | 氟硅酸 |
| | 六氟合硅(IV)酸 | 氟硅(IV)酸 |
| $Cu_2[SiF_6]$ | 六氟合硅酸(2-)-铜 | 氟硅酸(2-)-铜 |
| | 六氟合硅(IV)酸铜 | 氟硅(IV)酸铜 |
| $H_2[PtCl_6]$ | 六氯合铂酸 | 氯铂酸 |
| | 六氯合铂(IV)酸 | 氯铂(IV)酸 |

10.24 词尾

阴离子结尾一般用“某根”、“亚某根”(相当于英文名词-ide,

-ite 或 -ate 结尾)。阳离子和中性分子没有特定词尾。

例: SCN^- 硫氰根, ONO^- 亚硝酸根, NH_3 氨等。

10.25 配体位次

在配合物中配体列出的顺序按如下规定:

(1) 在配位个体中如既有无机配体又有有机配体, 则无机配体排列在前, 有机配体排列在后(见 10.232 (1) 例 2)。

(2) 在无机配体和有机配体中, 先列出阴离子的名称, 后列出阳离子和中性分子的名称(见 10.12 例 1 及 3)。

(3) 同类配体的名称, 按配位原子元素符号的英文字母顺序排列(见 10.12 例 2)。

(4) 同类配体中若配位原子相同, 则将含较少原子数的配体排在前面, 较多原子数的配体列后。

例: $[\text{PtNO}_2\text{NH}_3\text{NH}_2\text{OH}(\text{Py})]\text{Cl}$

氯化硝基·氨·羟胺·吡啶合铂(1+)

氯化硝基·氨·羟胺·吡啶合铂(II)

(5) 若配位原子相同, 配体中含原子的数目也相同, 则按在结构式中与配位原子相连的原子的元素符号的字母顺序排列。

例: $[\text{PtNH}_2\text{NO}_2(\text{NH}_3)_2]$ 氨基·硝基·二氨合铂

氨基·硝基·二氨合铂(II)

(6) 配体化学式相同但配位原子不同(如 $-\text{SCN}$, $-\text{NCS}$) 则按配位原子元素符号的字母顺序排列。若配位原子尚不清楚, 则以配位个体的化学式中所列的顺序为准。

10.3 配体命名

10.31 阴离子配体的命名

10.311 阴离子配体的命名

带倍数词头的无机含氧酸阴离子配体命名时, 要用括号括起来, 如(三磷酸根)。有的无机含氧酸阴离子, 即使不含有倍数词头, 但含有一个以上直接相连的成酸原子, 也要用括号, 如(硫代硫酸根)、此外硒代、碲代的类似物也照此处理。

10.312 某些例外

按 10.24 的规定本应用“根”字结尾，但有下列情况的阴离子则不用“根”字。

(1) NH_2^- (amide) 按习惯用法称为氨基。

(2) 某些中文名称的单音节阴离子，也可用单音节名称代替阴离子名。

| 化学式 | 阴离子名 | 配体名 |
|-------------------|--------|-----|
| F^- | 氟根 | 氟 |
| Cl^- | 氯根 | 氯 |
| Br^- | 溴根 | 溴 |
| I^- | 碘根 | 碘 |
| O^{2-} | 氧根 | 氧 |
| H^- | 氢根 | 氢 |
| S^{2-} | 硫根 | 硫 |
| S_2^{2-} | 双硫根 | 双硫 |
| OH^- | 氢氧(羟)根 | 羟 |
| HS^- | 硫氢根 | 巯 |
| CN^- | 氰根 | 氰 |

例：

1. $\text{Na}_2[\text{B}(\text{NO}_3)_4]$ 四硝酸根合硼酸(1-)钠

四硝酸根合硼(III)酸钠

2. $\text{K}_2[\text{OsCl}_5\text{N}]$ 五氯·氮合锇酸(2-)钾

五氯·氮合锇(VI)酸钾

3. $[\text{Co}(\text{NH}_2)_2(\text{NH}_3)_4]\text{OC}_2\text{H}_5$

乙氧化二氨基·四氨合钴(1+)

乙氧化二氨基·四氨合钴(III)

4. $\text{Na}_3[\text{Ag}(\text{S}_2\text{O}_3)_2]$ 二(硫代硫酸根)合银酸(3-)钾

二(硫代硫酸根)合银(I)酸钾

5. $\text{NH}_4[\text{Cr}(\text{NCS})_4(\text{NH}_3)_2]$

四(异硫氰酸根)·二氨合铬酸(1-)铵

- 四(异硫氰酸根)·二氨合铬(III)酸铵
6. $K[AgF_4]$ 四氟合银酸(1-)钾
四氟合银(III)酸钾
7. $Ba[BrF_4]_2$ 四氟合溴酸(1-)钡
四氟合溴(III)酸钡
8. $Cs[ICl_4]$ 四氯合碘酸(1-)铯
四氯合碘(III)酸铯
9. $K[Au(OH)_4]$ 四羟合金酸(1-)钾
四羟合金(III)酸钾
10. $K[CrF_4O]$ 四氟·氧合铬酸(1-)钾
四氟·氧合铬(V)酸钾
11. $K_2[Cr(CN)_2O_2(O_2)NH_3]$
二氰·过氧根·氨·双氧合铬酸(2-)钾
二氰·过氧根·氨·双氧合铬(VI)酸钾
12. $[As_4S_4]^{3-}$ 四硫合砷酸根(3-)离子
四硫合砷(V)酸根离子

10.313 烃基配体

当烃基连接于金属时,一般都表现为阴离子,在计算氧化数时也把它们当作阴离子。但在配位个体中还是按照一般的基来命名。
例:

1. $K[B(C_6H_5)_4]$ 四苯基合硼酸(1-)钾
四苯基合硼(III)酸钾
2. $K[SbCl_5(C_6H_5)]$ 五氯·苯基合锑酸(1-)钾
五氯·苯基合锑(V)酸钾
3. $K_2[Cu(C_2H)_3]$ 三(乙炔基)合铜酸(2-)钾
三(乙炔基)合铜(I)酸钾
4. $K_4[Ni(C_2C_6H_5)_4]$ 四(苯乙炔基)合镍酸(4-)钾
四(苯乙炔基)合镍(0)酸钾
5. $[Fe(C_2C_6H_5)_2(CO)_4]$
四羰基·二(苯乙炔基)合铁

四羧基·二(苯乙炔基)合铁(II)

10.314 有机阴离子

(1) 从有机化合物失去质子而形成的阴离子都用“根”字结尾(10.313 除外)。

例: CH_3COO^- 乙酸根
 CH_3ESOO^- 甲基亚硫酸根
 $(\text{CH}_3)_2\text{N}^-$ 二甲氮根
 CH_3CONH^- 乙酰氮根

(2) 如配体为中性分子, 则用其原来的有机物名称, 不再更动(见 10.321)。

(3) 有机配体一律用括号括起来, 如(苯甲酸根), (对氯苯酚根), [2-(氯甲基)-1-萘酚根]。

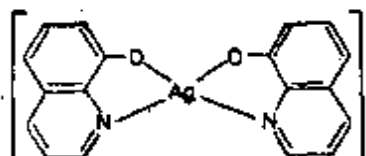
(4) 有机阴离子所带的电荷数应在配体名称后用圆括号表示, 但一价负离子可不标出。

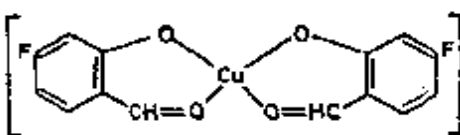
$-\text{OOCCH}(\text{O}^-)\text{CH}(\text{OH})\text{COO}^-$ 酒石酸根(3-)
 $-\text{OOCCH}(\text{OH})\text{CH}(\text{OH})\text{COO}^-$ 酒石酸根(2-)

(5) 对有机配体命名时均采用有机化合物系统命名法, 不得用俗名。如铜铁灵 cupferron, 双硫腙 dithizone 应依次命名为 *N*-亚硝基-*N*-苯基羟胺, 1, 5-二苯基硫代缩二氨基脲。但有一些习用名称可以表明有机物的结构, 如乙酰丙酮、8-羟基喹啉等, 仍可同时采用。

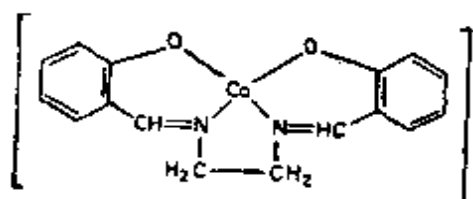
例:

1. $[\text{Cu}(\text{C}_5\text{H}_7\text{O}_2)_2]$ 二(2, 4-戊二酮根)合铜
 二(乙酰丙酮根)合铜(II)

2.  二(8-喹啉酚根)合银
 二(8-羟基喹啉根)合银(II)

3.  二(4-氟水杨醛根)合铜
 二(4-氟水杨醛根)合铜(II)

4.



[*N*, *N'*-(二羟苯次甲基)乙二氮根]合钴 [*N*,
N'-亚乙基二(水杨醛缩亚氮)根]合钴

10.32 中性配体和阳离子配体的命名

中性配体和阳离子配体在命名时一般保留原来名称不变,但中性配体 NO 和 CO 例外,分别称为亚硝酰和羰基。在计算氧化数时中性配体皆作为零。在化学式内,中性配体和阳离子配体的化学符号,必要时要用括号括起来,以免混淆。如 10.312 例 11 的 O_2 代表过氧根负离子 O_2^{2-} ,不加括号,而 (O_2) 代表中性的双氧配体。10.312 例 2 的 N 代表氮负离子 N^{3-} ,不加括号,而下面例 12 的 (N_2) 代表中性的双氮配体。

例:

1. $[PtCl_2\{H_2NCH_2CH(NH_2)CH_2NH_3\}]Cl$
氯化二氯·(2,3-二氨基丙铵)合铂(1+)
氯化二氯·(2,3-二氨基丙铵)合铂(II)
2. $[NiCl_3(H_2O)\{N(CH_2CH_2)_3NCH_3\}]$
三氯·水{1-甲基-4-氮杂-1-氮杂双环[2.2.2]辛烷}
合镍
三氯·水·{1-甲基-4-氮杂-1-氮杂双环[2.2.2]辛烷}合镍(II)
3. $[CoCl_2(C_4H_8N_2O_2)_2]$
二氯·二(2,3-丁二酮二肟)合钴
二氯·二(2,3-丁二酮二肟)合钴(II)
4. $[Pt(py)_4][PtCl_4]$
四氯·铂酸(2-)-四(吡啶)合铂(2+)
四氯·铂(II)酸四(吡啶)合铂(II)
5. *Cis*- $[PtCl_2(Et_3P)_2]$

- 顺-二氯·二(三乙基膦)合铂
顺-二氯·二(三乙基膦)合铂(II)
6. $[\text{Fe}(\text{bpy})_3]\text{Cl}_2$
二氯化三(2,2-联吡啶)合铁(2+)
二氯化三(2,2-联吡啶)合铁(II)
7. $[\text{CuCl}_2(\text{CH}_3\text{NH}_2)_2]$
二氯·二(甲胺)合铜
二氯·二(甲胺)合铜(II)
8. $[\text{Co}(\text{en})_3]_2(\text{SO}_4)_3$
硫酸三(乙二胺)合钴(3+)
硫酸三(乙二胺)合钴(III)
9. $[\text{Zn}\{\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{NH}_2)\text{CH}_2\text{NH}_2\}_2]\text{I}_2$
二碘化二(1,2,3-丙三胺)合锌(2+)
二碘化二(1,2,3-丙三胺)合锌(II)
10. $[\text{Cr}(\text{C}_6\text{H}_5\text{NC})_6]$ 六(苯基异氰)合铬
六(苯基异氰)合铬(0)
11. $\text{K}[\text{PtCl}_3(\text{C}_2\text{H}_4)]$ 三氯·(乙烯)合铂酸(1-)-钾
三氯·(乙烯)合铂(II)酸钾
12. $[\text{Ru}(\text{N}_2)(\text{NH}_3)_5]\text{Cl}_2$
二氯化双氮·五氨合钌(2+)
二氯化双氮·五氨合钌(II)
13. $[\text{CoH}(\text{N}_2)\{(\text{C}_6\text{H}_5)_3\text{P}\}_3]$
氢·双氮·三(三苯基膦)合钴
氢·双氮·三(三苯基膦)合钴(I)

10.33 配位原子的标示

10.331 不同种类配位原子的标示

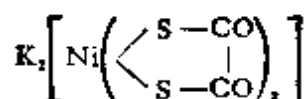
(1) 一个配体上有几种可能配位的原子,为了标明哪一个原子配位,必需把配位原子的元素符号放在配体名称之后。如二硫代草酸根($-\text{S}-\text{CO}-\text{CO}-\text{S}-$)的硫和氧原子均可能是配位原子,若硫为配位原子则用“二硫代草酸根-S, S'”表示,若氧是配位

原子, 则用“二硫代草酸根- O, O' ”表示。若配体是不对称的, 则配位原子按其元素符号的英文字母顺序排列。

(2) 同组分配体的不同的配位原子也可以用不同的名称来表示, 如“硫氰酸根”表示 $-SCN$, 为硫原子配位, “异硫氰酸根”表示 $-NCS$, 为氮原子配位。“亚硝酸根”表示 $-ONO$, 为氧原子配位, “硝基”表示 $-NO_2$, 为氮原子配位。若配位原子尚不清楚, 就应当用“硫氰酸根”, “亚硝酸根”。

例:

1.



二(二硫代草酸根- S, S')合镍酸(2-) 钾

二(二硫代草酸根- S, S')合镍(II)酸钾

2. $K_2[Pt(NO_2)_4]$ 四硝基合铂酸(2-) 钾

四硝基合铂(II)酸钾

3. $Na_3[Co(NO_2)_6]$ 六硝基合钴酸(3-) 钠

六硝基合钴(III)酸钠

4. $[Co(NO_2)_3(NH_3)_3]$

三硝基·三氨合钴

三硝基·三氨合钴(III)

5. $[Co(ONO)(NH_3)_5]SO_4$

硫酸亚硝酸根·五氨合钴(2+)

硫酸亚硝酸根·五氨合钴(III)

6. $[Co(NCS)(NH_3)_5]Cl_2$

二氯化异硫氰酸根·五氨合钴(2+)

二氯化异硫氰酸根·五氨合钴(III)

(3) 如从配体名称可以看出配位的原子, 则不必加以标明。

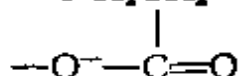
例:

1. $[Pt(CH_3)_3\{CH(COCH_3)_2\}(bpy)]$

三甲基·(1-乙酰丙酮根)·(2, 2'-联吡啶)合铂

三甲基·(1-乙酰丙酮根)·(2, 2'-联吡啶)合铂(IV)

2. $-\text{NH}_2\text{CH}_2$ 氨基乙酸根-O, N



此处-O, N 可略去,因从名称可以看出,但下列情况不能省略。

3. $-\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH}$ 氨基乙酸-N

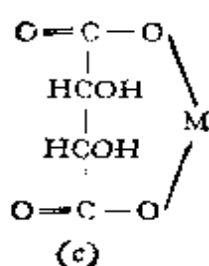
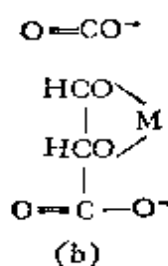
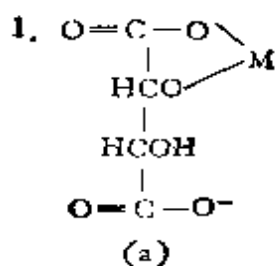
4. $-\text{OOCCH}_2\text{NH}_2$ 氨基乙酸根-O

5. $-\text{OOCCH}_2\text{N}^+\text{H}_3$ 氨基乙酸-O

10.332 相同种类配位原子的标示

当一个配体上有几个相同的可能配位的原子,为了标明是哪个原子参加配位,则在配位原子元素符号的右上角用阿拉伯数字标明其位次。

例:



(a): 酒石酸根(3-)- O^1, O^3

(b): 酒石酸根(4-)- O^2, O^3

(c): 酒石酸根(2-)- O^1, O^4

2. $\text{CH}_3\text{COCH}(\text{COCH}_3)$ 2, 4-戊二酮根- C^3



10.34 配体名称的缩写符号

在有关配位化合物的文献中,广泛使用缩写符号。下面列出使用规则及常用的缩写符号。

(1) 缩写符号应当短,一般不得超过四个字母。

(2) 配位化合物中使用的缩写符号不得与有机基团习用的缩写符号相混,如在有机化学文献中,Me 指甲基,Et 指乙基,Ph 指苯基等。

(3) 配体所用缩写符号都要用小写字母,如 en, pn, py 等,但

在配位化合物中常用大写字母 L 作配体的缩写，用大写字母 M 作金属的缩写。此外(5),(7)条中举出了配体中需用大写字母的情况。

(4) 缩写符号中不要用短横，如邻菲绕啉 (*o*-phenanthroline 或 1, 10-phenanthroline) 只能用 phen 代表，不要用 *o*-phen 代表。

(5) 中性配体和它衍生的配体离子应区分清楚，如：

| | |
|---------------------|---|
| Hacac | 乙酰丙酮 (acetylacetone) |
| acac | 乙酰丙酮根 (acetylacetonate) |
| H ₂ dmg | 二甲基乙二脞 (dimethylglyoxime) |
| | 2, 3-丁二酮二脞 (2, 3-butanedione dioxime) |
| Hdmg | 二甲基乙二脞根 (1-)(dimethylglyoximate (1-)) |
| H ₄ edta | 乙二胺四乙酸 (ethylene diaminetetraacetic acid) |
| Hedta 或 edta | 从 H ₄ edta 衍生的配体 |

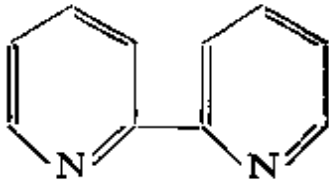
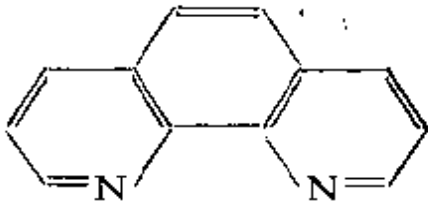
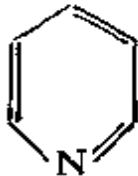
(6) 缩写符号应当和元素符号用空位分开，或括在括弧中，以免混淆，如三(乙二胺)合钴(III)离子应写为

$[\text{Co}(\text{en})_3]^{3+}$ 或 $[\text{Co} \text{ en}_3]^{3+}$ ，不得写为 $[\text{Coen}_3]^{3+}$ 。

(7) 分子或离子的缩写不能和有机基团的习用符号联在一起，例如不能用 Eten 代表 *N*-乙基乙二胺 (*N*-ethylethylenediamine)，不得用 Meacac 代表甲基乙酰丙酮 (methylacetylacetone)，不得用 Erbg 代表乙基双脞 (ethylbiguanide)。对有机配体应优先采用简单习用符号，如 $\text{CH}_3\text{COCH}(\text{C}_2\text{H}_5)\text{COCH}_3$ 的习用符号为 HCEtAc₂。

(8) 常用的缩写符号如下：

| | |
|---------------------|---|
| Hacac | 乙酰丙酮或 2, 4-戊二酮 $\text{CH}_3\text{COCH}_2\text{COCH}_3$ (acetylacetone 或 2, 4-pentanedione) |
| Hbg | 双脞 $\text{H}_2\text{NC}(\text{NH})\text{NHC}(\text{NH})\text{NH}_2$ (biguanide) |
| H ₂ dmg | 二甲基乙二脞 $\text{CH}_3\text{C}(=\text{NOH})\text{C}(=\text{NOH})\text{CH}_3$ (dimethylglyoxime) |
| H ₄ edta | 乙二胺四乙酸 (ethylenediaminetetraacetic acid) |

| | | |
|-------------------|--|---|
| H ₂ ox | 草酸 (oxalic acid) | $(\text{HOOCCH}_2)_2\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{N}(\text{CH}_2\text{COOH})_2$ HOOC—COOH |
| bpy | 2, 2'-联吡啶 (2, 2'-bipyridine) |  |
| diars | 邻亚苯基双(二甲肼) (o-phenylenebis(dimethylarsine)) | $(\text{CH}_3)_2\text{AsC}_6\text{H}_4\text{As}(\text{CH}_3)_2$ |
| dien | 二乙三胺 (diethylenetriamine) | $\text{H}_2\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{NHCH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2$ |
| diphos | 1, 2-亚乙基双(二苯基膦) (ethylenebis(diphenylphosphine)) | $\text{Ph}_2\text{PCH}_2\text{CH}_2\text{PPh}_2$ |
| en | 乙二胺 (ethylenediamine) | $\text{H}_2\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2$ |
| phen | 1, 10-菲绕啉 (1, 10-phenanthroline) |  |
| pn | 丙二胺 (propylenediamine) | $\text{H}_2\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2$ |
| py | 吡啶 (pyridine) |  |
| tren | 2, 2', 2''-三氨基三乙基胺 (2, 2', 2''-triaminotriethylamine) | $(\text{H}_2\text{NCH}_2\text{CH}_2)_3\text{N}$ |
| trien | 三乙四胺 (triethylenetetraamine) | $(\text{H}_2\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{NHCH}_2)_2$ |
| ur | 脲素 (urea) | $(\text{H}_2\text{N})_2\text{CO}$ |

10.4 π 键配合物的命名

配体的 π 键电子与金属结合形成 π -配合物, 但在 π -配合物中金属和配体成键的性质尚不完全清楚, 故命名不作重大改变。仍用习用的有机物名称, 并把配位原子标志出来, 再用计量词头表示中心原子与配体的计量组成。

10.41 整比组分的命名

例:

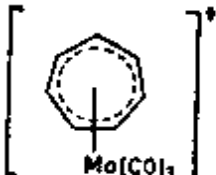
- | | |
|---|---|
| 1. $[\text{PtCl}_2\text{NH}_3(\text{C}_2\text{H}_4)]$ | 二氯·氨·(乙烯)合铂 二氯·氨·(乙烯)合铂(II) |
| 2. $\text{K}[\text{PtCl}_3(\text{C}_2\text{H}_4)]$ | 三氯·(乙烯)合铂酸(1-)-钾 三氯·(乙烯)合铂(II)酸钾 |
| 3. $[\text{Cr}(\text{C}_6\text{H}_6)_2]$ | 二(苯)合铬 二(苯)合铬(0) |
| 4. $[\text{Ni}(\text{C}_5\text{H}_5)_2]$ | 二(茂)合镍 二(茂)合镍(II) 二茂镍 |
| 5. $[\text{Fe}(\text{CO})_3(\text{C}_8\text{H}_8)]$ | 三羰基·(环辛四烯)合铁 三羰基·(环辛四烯)合铁(0) |
| 6. $[\text{Mn}(\text{CO})_4\{\text{CH}_2=\text{C}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\}]$ | 四羰基·(2-甲基烯丙基)合锰 四羰基·(2-甲基烯丙基)合锰 (I) |

10.42 结构的标示法 如果除按 10.41 表示中心原子与配体的计量组成外, 还须标明配位原子的键合方式, 则按下列规定进行。

10.421 如果配体中的链或环上所有原子都键合于一个中心原子, 则在配体名称(如 10.41)前加上词头 η 。

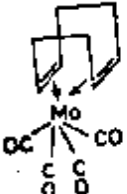
- | | |
|---|--|
| 1. $[\text{PtCl}_2\text{NH}_3(\text{C}_2\text{H}_4)]$ | 二氯·氨·(η -乙烯)合铂 二氯·氨·(η -乙烯)合铂(II) |
|---|--|

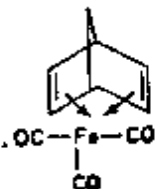
2. $K[PtCl_3(C_2H_4)]$ 三氯·(η-乙烯)合铂酸(1-)钾
三氯·(η-乙烯)合铂(II)酸钾
3. $[Cr(C_6H_6)_2]$ 二(η-苯)合铬
二(η-苯)合铬(0)
4. $[Ni(C_5H_5)_2]$ 二(η-茂)合镍
二(η-茂)合镍(II)
5. $[ReH(C_5H_5)_2]$ 氢·二(η-茂)合铼
氢·二(η-茂)合铼(III)
6. $[Cr(CO)_3(C_6H_6)]$ 三羰基·(η-苯)合铬
三羰基·(η-苯)合铬(0)
7. $[Co(C_5H_5)(C_5H_6)]$ (η-茂)·(η-环戊二烯)合钴
(η-茂)·(η-环戊二烯)合钴(I)
8. $[Ni(C_5H_5)(NO)]$ 亚硝酰·(η-茂)合镍
亚硝酰·(η-茂)合镍(I)

9.  三羰基·(η-萘)合钼(1+)离子
三羰基·(η-萘)合钼(0)离子

10.422 当多重键上的配位原子都配位在一个原子上时, 其命名法和 10.421 一样。

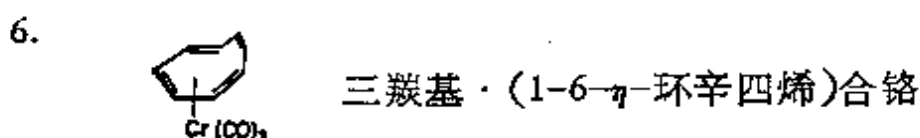
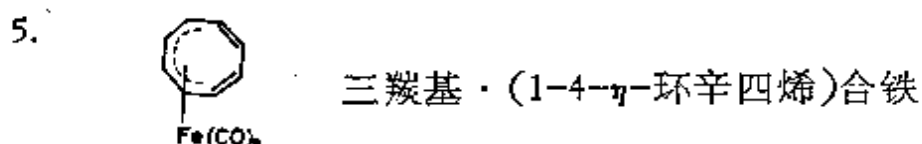
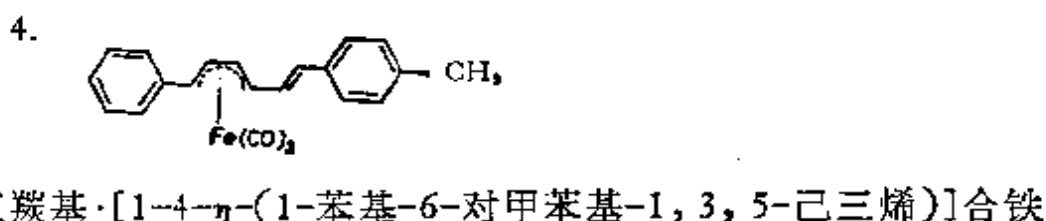
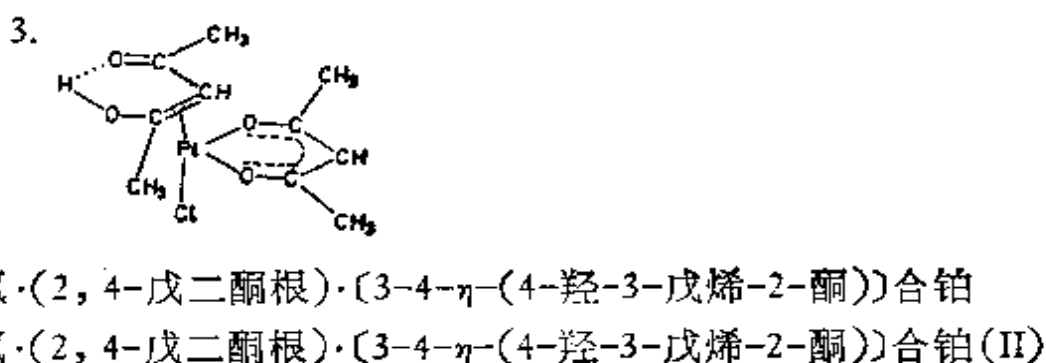
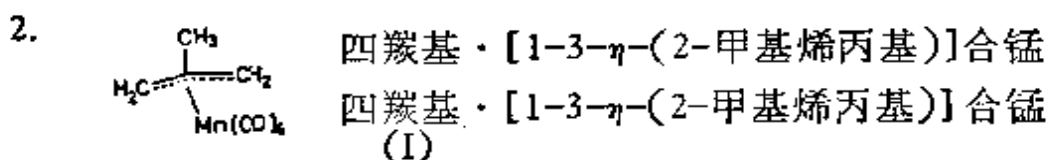
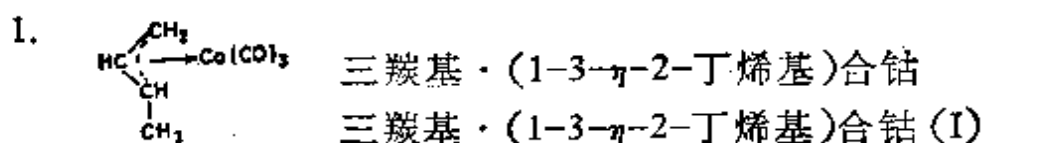
例:

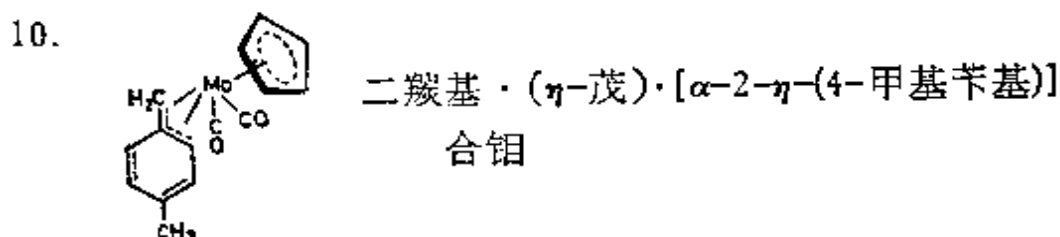
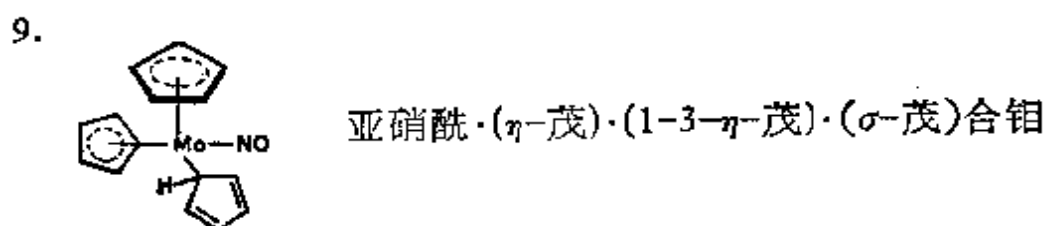
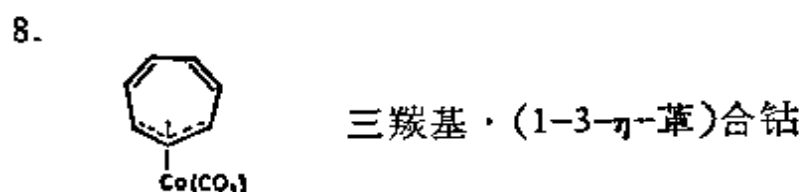
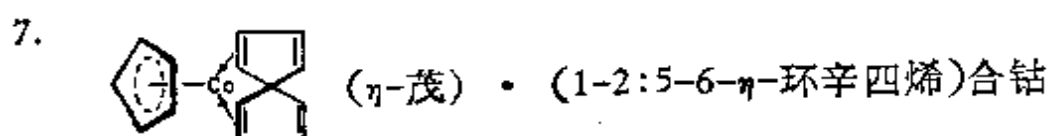
1.  四羰基·(η-1,5-环辛二烯)合钼
四羰基·(η-1,5-环辛二烯)合钼(0)

2.  三羰基·(η-二环(2.2.1)庚-2,5-二烯)合铁
三羰基·(η-二环(2.2.1)庚-2,5-二烯)合铁(0)

10.423 若配体的链上或环上只有一部分原子参加配位，或其中一部分双键原子参加配位，则在 η 前插入参加配位原子的位标，如果是配体中相邻的几个原子与中心原子成键，则可将第一个配位原子的位标 1 与最末的配体原子的位标 n 列出，写成 (1- n)，如果着重说明配体中一个原子与中心原子成键，则应将词头 σ -加在此配体前(见例 9)。

例：





10.43 二茂铁配合物

η-环戊二烯基 (η-cyclopentadienyl) 和铁的配合物称为二 (η-茂)合铁, 简称二茂铁 (ferrocene)。

例:

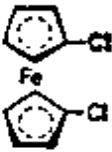
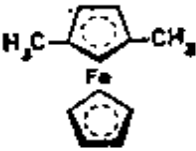
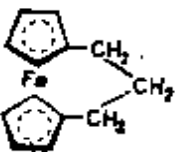
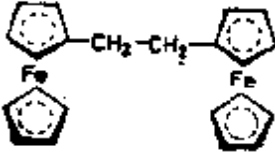
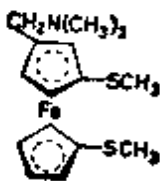
1. $\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_5)_2$ 二 (η-茂)合铁
二 (η-茂)合铁 (II)
二茂铁
2. $[\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_5)_2][\text{BF}_4]$ 四氟 · 硼酸二 (η-茂)合铁 (1+)
四氟 · 硼酸二 (η-茂)合铁 (III)
四氟 · 硼酸 (1-)二茂铁 (1+)
四氟 · 硼酸二茂铁

10.431 二茂铁的衍生物

二茂铁的衍生物有两种命名法, 一种是将“茂”作为母体, 另一种是将二茂铁作为取代基, 两种命名法均可通用。

(1) “茂”作为母体的命名法：将茂环上的取代基放在二茂铁名称之前，并标出取代基的位次，(为方便起见，取代基给予最低位次)，第二个环上的取代基位次用带撇号的数字标出(如 1', 2' 等)。如果化合物有两个二茂铁，则第三、四个茂基用二撇和三撇数字(1'', 1''' 等)标出。

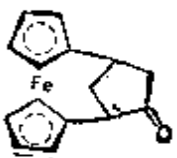
例：

1.  1, 1'-二氯二茂铁
2.  1, 3-二甲基二茂铁
3.  1, 1'-(1,3-亚丙基)二茂铁
1, 3-(1, 1'-二茂铁二基)丙烷(参见(2)条)
4.  1, 1''-(1,2-亚乙基)双二茂铁
5.  1, 1'-二(甲硫基)-3-[(二甲胺)甲基]二茂铁

6. $[\text{Fe}(\text{C}_2\text{H}_5\text{C}_5\text{H}_4)(\text{C}_5\text{H}_5)]\text{Cl}$ 氯化乙基二茂铁(1+)
氯化乙基二茂铁

(2) 二茂铁基作为取代基：二茂铁衍生物可以看作在某一母体中含有二茂铁取代基，则可按有机母体上有取代基来命名，必要时二茂铁可称为二茂铁基 ferrocenyl，二茂铁二基 ferrocendiyl(见例 9)。

例:

1. $(C_{10}H_9Fe)-COCH_3$ 二茂铁(基)甲(基)(甲)酮
乙酰二茂铁
2. $(C_{10}H_9Fe)-CHO$ 二茂铁(基)甲醛
甲酰二茂铁
3. $(C_{10}H_9Fe)-CH_2OH$ 二茂铁(基)甲醇
(羟甲基)二茂铁
4. $(C_{10}H_9Fe)-COOH$ 二茂铁(基)甲酸
羧基二茂铁
5. $(C_{10}H_9Fe)-CH_2CHNH_2COOH$
2-氨基-3-二茂铁(基)丙酸
3-二茂铁(基)丙氨酸
6. $(C_{10}H_9Fe)-As(C_6H_5)_2$ 二茂铁(基)二苯胂
(二苯胂基)二茂铁
7. $(C_{10}H_9Fe)_2NC_2H_5$ *N*-乙基-1,1'-双(二茂铁基)胺
8. $(C_{10}H_9Fe)-N^+(CH_3)_3$ 二茂铁(基)三甲铵离子
(三甲铵基)二茂铁
9.  2,4-(1,1'-二茂铁二基)环戊酮

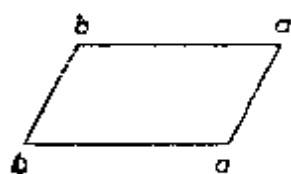
10.5 异构体的命名

在配位化合物中有多种异构现象发生,现将几何异构体与手性异构体的命名法则规定如下,其他异构体可按一般法则命名。

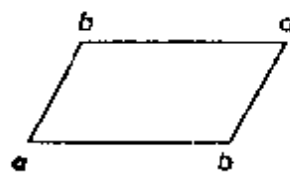
10.51 几何异构体的命名

10.511 简单配位化合物几何异构体的命名

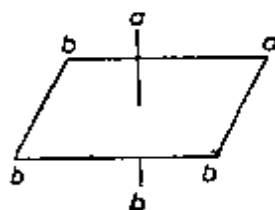
用词头顺-(*cis*-),反-(*trans*-),面-(*fac*-),经-(*mer*-)对下列构型的几何异构体进行命名。



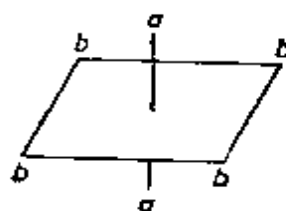
顺-(cis-)



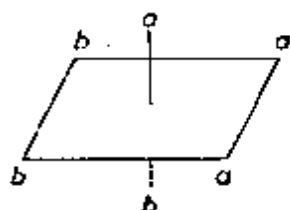
反-(trans-)



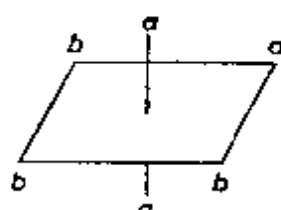
顺-(cis-)



反-(trans-)



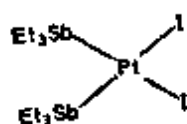
面-(fac-)
面式 (facial)



经-(mer-)
经式 (meridional)

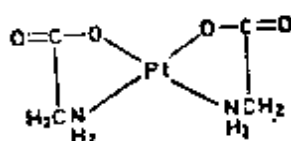
例:

1.



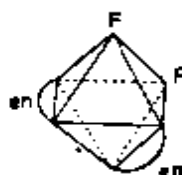
顺-二碘·二(三乙腈)合铂
顺-二碘·二(三乙腈)合铂(II)

2.



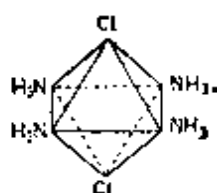
顺-二[氨基乙酸根-O,N]合铂
顺-二[氨基乙酸根-O,N]合铂(II)

3.



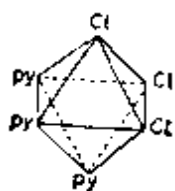
顺-二氟·二(乙二胺)合钴(1+)离子
顺-二氟·二(乙二胺)合钴(III)离子

4.



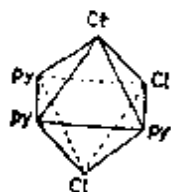
反-二氯·四氨合铬(1+)离子
反-二氯·四氨合铬(III)离子

5.



面-三氯·三(吡啶)合钇
面-三氯·三(吡啶)合钇(III)

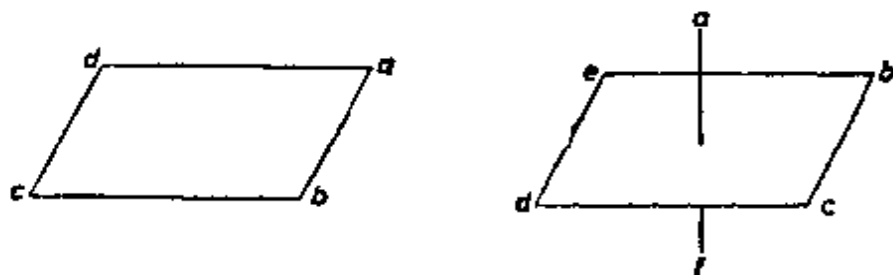
6.



经-三氯·三(吡啶)合钇
经-三氯·三(吡啶)合钇(III)

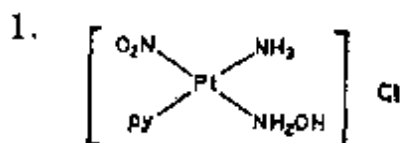
10.512 含多种配体的配位化合物的几何异构体的命名。

若配位化合物中含有几种配体,上述词头如不够用,则用小写英文字母作为位次标志(位标)来标明其空间位置。平面四方形和八面体构型的位次规定如下:



在命名时首先列出的配体给予最低的位标 a。第二列出的配体给予次低的位标。其余的配体则按其在配位层中的位置照上图排好的字母,先上层,后下层,予以标明。几个字母之间不要用逗号分开。

例:

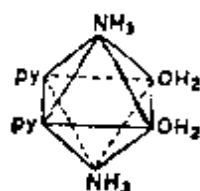


氯化 a-硝基·b-氨·c-羟胺·d-(吡啶)合铂(1+)

氯化 a-硝基·b-氨·c-羟胺·d-(吡啶)合铂(II)

(因 NO_2^- 为负离子,应列在前面,故定为 a 位,其余配体再按顺时针方向依次定位。)

2.



*a*f-二氨 · *b*c-二水 · *d*,-二(吡啶)合钴(3+)离子

*a*f-二氨 · *b*c-二水 · *d*e-二(吡啶)合钴(III)离子

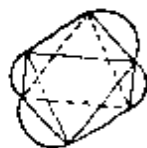
10.513 螯合配体应用位标的原则

螯合配体名称前位标的顺序应与配体名称之后所列出的配位原子的顺序一致。

(1) A—A型配体 从配体一端数起用英文字母依次标出配位原子在配位层中的位置。

这些原则不仅可以用于线型配体，而且适合于环上具有线型的配体，因为环可以看成是线型配体的取代基。

例：



∪∪代表 $\text{H}_2\text{NCH}_2\text{CH}(\text{NH}_2)\text{CH}_2\text{NH}_2$

abc, *edf*-二(1, 2, 3-丙三胺)合钴(3+)离子

abc, *edf*-二(1, 2, 3-丙三胺)合钴(III)离子

(2) A—X型配体 按下述原则之一，选定首先列出的配位原子，然后依次编定位标。

(i) 如配体的两端有不同的配位原子，则按其元素符号的英文字母顺序排列。

例：

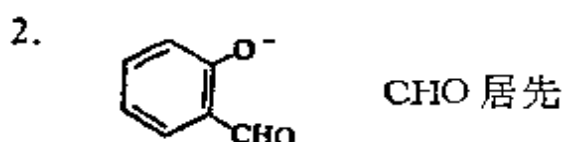
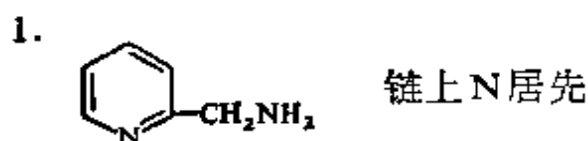
1. $\text{H}_2\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{SR}$ N居先

2. $-\text{OOCCH}_2\text{NH}_2$ N居先

3. $\sigma\text{-R}_2\text{AsC}_6\text{H}_4\text{PR}_2$ As居先

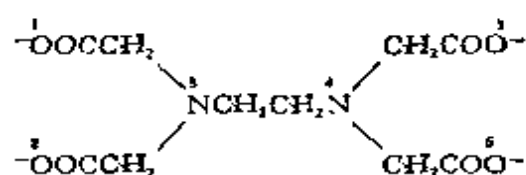
(ii) 若配体两端的配位原子相同，但与配位原子相连的其它原子不同，则所连原子较少的配位原子先列。若所连其它原子数目相同，则所连原子元素符号的英文字母居先的配位原子先列。如含有环及链的配体则链上的原子先列。

例:

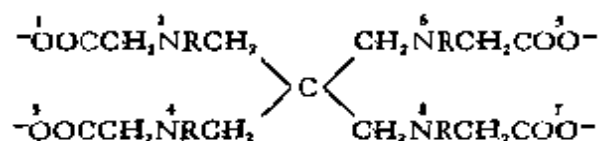


(3) 对称支链的配体 照下述各条规则对配位原子用数字标明位次, 位次的顺序相应于各配位原子按 10.512 规定的位标。

(i) 对 A_2-A_2 型对称支链配体, 将一端的一对配位原子依次标明位次, 再将支链中间的配位原子依次编位, 最后将另一端的一对配位原子编上位次。

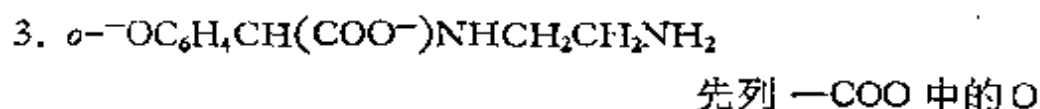
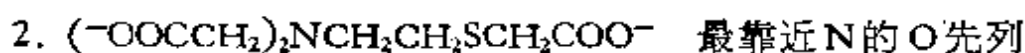
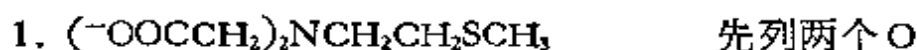


(ii) 对 $(\text{AB})_2-(\text{BA})_2$ 型对称支链配体, 其编位顺序如 A_2-A_2 型, 只不过要在其一个支链上的配位原子全部编完后再给相应支链的配位原子编位。



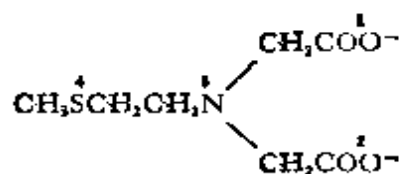
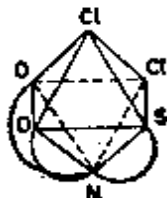
(4) 对于不对称的支链配体 可以应用(2)条规定的原则来确定先列哪个配位原子, 其它部位可按照(3)条来编位。

例:





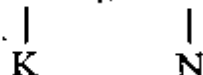
右边的O先列



ab -二氯· $defc$ -{[2-(甲硫基)乙基]亚氨基二乙酸根-O, O', N, S}合铂

ab -二氯· $defc$ -{[2-(甲硫基)乙基]亚氨基二乙酸根-O, O', N, S}合铂(IV)

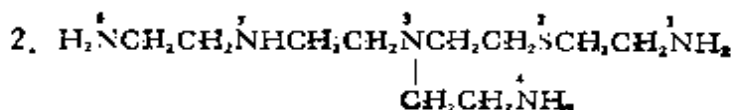
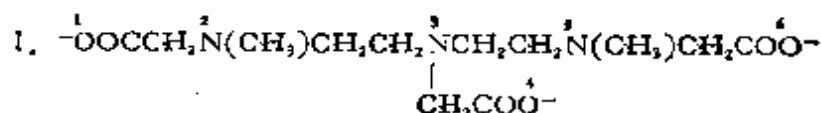
(5) 对于有中间支链的 A—A 和 A—X 型的配体其线型部分



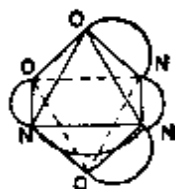
的位置。可按照正常方法标明位次，但把中间支链的位标用括弧插在连接点之处。

这条原则只适用于六齿和齿数更多的配体因为齿数较少的配体可应用上述其他原则。

例:



3.



$\text{O}\text{---}\text{N}(\text{---}\text{N}\text{---}\text{O})_2$ 代表 $-\text{OOCCH}_2\text{N}\{\text{CH}_2\text{CH}_2\text{N}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{COO}^-\}_2$

$abc(f)de$ -[二(2-甲氨基乙基)胺-N, N', N''-三乙酸根-O,

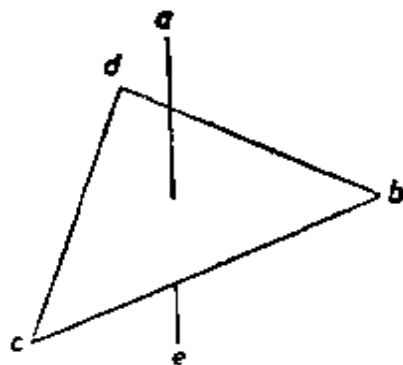
$N, N', O', N'', O''']$ 合钴

$abc(f)de-$ [二(2-氨基乙基)胺- N, N', N'' -三乙酸根- $O,$

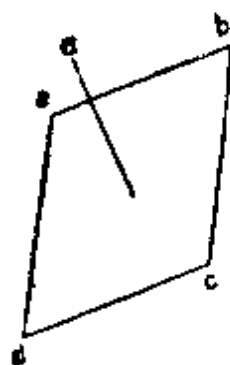
$N, N', O', N'', O''']$ 合钴(III)

10.514 复杂构型的位标顺序

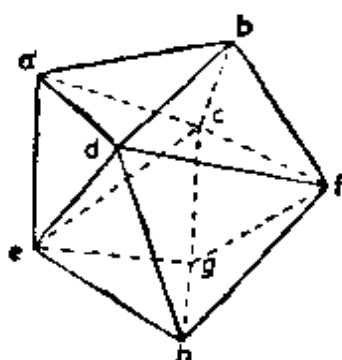
对复杂构型的位标规定如下:



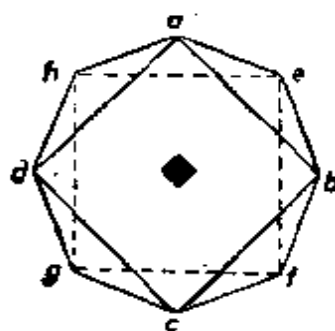
三角双锥



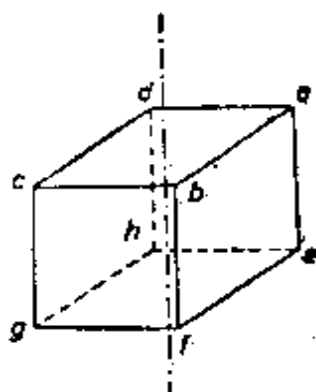
正方锥



对角十二面体



正方反棱柱



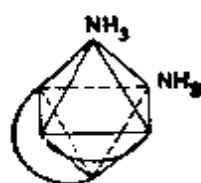
立方体(正六面体)

10.52 手性异构体

(1) 应用位标区别手性异构体的例子

例:

1.

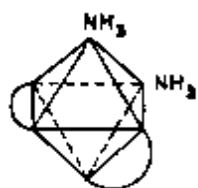


—代表 $\text{H}_2\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2$

ab -二氨· cd , ef -二(乙二胺)合铂(4+)离子

ab -二氨· cd , ef -二(乙二胺)合铂(IV)离子

2.



—代表 $\text{H}_2\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2$

ab -二氨· cf , de -二(乙二胺)合铂(4+)离子

ab -二氨· cf , de -二(乙二胺)合铂(IV)离子

(2) 如配位化合物的绝对构型还不知道,依然可以用位标,即在整个名词前面加上一个词头“X”,和所观察到的旋光符号(+或-),并可附上特定波长,例如:

(+)₅₈₉X- ab -二氨· cd , ef -二(乙二胺)合铂(4+)离子

就是指在 589nm 时为右旋的化合物,其构型为例 1 或例 2 中的任何一个。

(3) 如果已知为外消旋混合物,则在一个对映体的名称前加上词头“消旋”,例如下列名称就代表例 1 和例 2 的消旋混合物

消旋- ab -二氨· cd , ef -二(乙二胺)合铂(4+)离子

10.6 多核配合物的命名

10.61 具有桥联原子或桥联基团的化合物

10.611

(1) 在桥联基团(或原子)的前面加上希腊字母 μ 并在桥联基团(或原子)名称之后加上中圆点与配位化合物中其它配体分开。

(2) 两个或多个相同的桥联基团,用二- μ 等来表示。

(3) 同一种配体有的是桥联基团,有的不是桥联基团,则先列

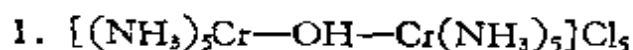
出桥联基团。对不同种类的配体则按 10.25 所规定的配体名次列出。

如果分子是对称的,应用倍数词头可得到较简单的名称,则不受此限制(见例 1, 2)。

(4) 两个中心原子连接于桥联基团的不同原子时,则在桥联基团名称之后加上该原子的元素符号来标明(见例 6)。

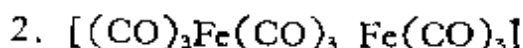
(5) 如一个桥联基团所连接的中心原子数目不止两个,则在 μ 的右下角用阿拉伯数字标明(见例 7)。

例:

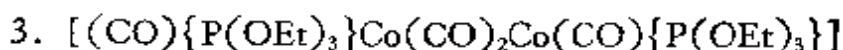


五氯化 μ -羟·二(五氨合铬)(5+)

五氯化 μ -羟·二[五氨合铬(III)]

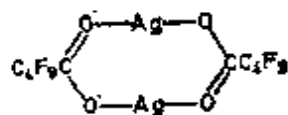


三(μ -羰基)·二(三羰基合铁)



二(μ -羰基)·二[羰基·(亚磷酸三乙酯)合钴]

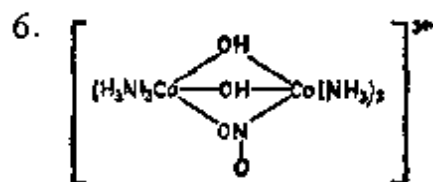
4.



二(μ -九氟代戊酸根-O, O')合二银

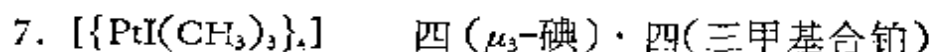


二(μ -乙硫基)·四亚硝酰合二铁



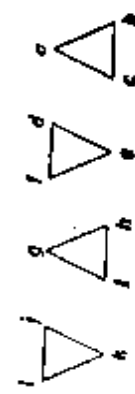
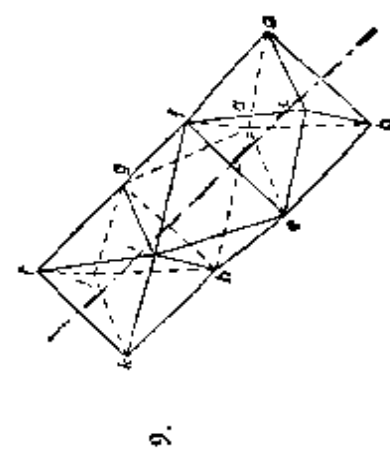
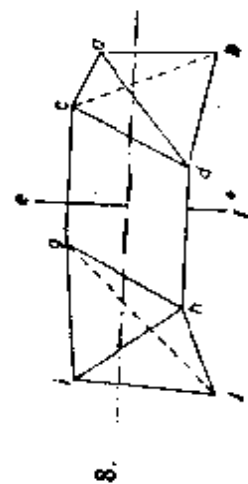
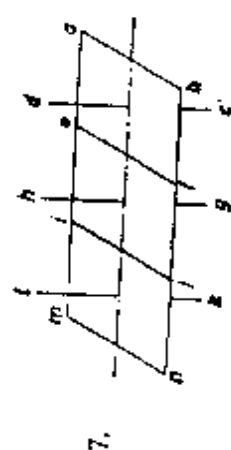
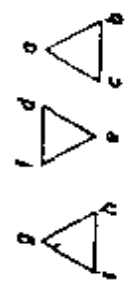
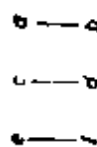
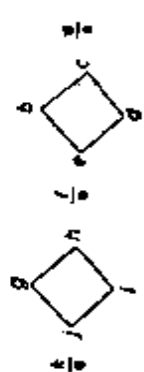
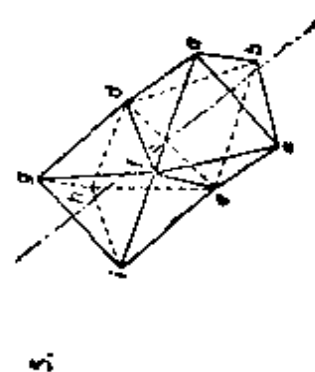
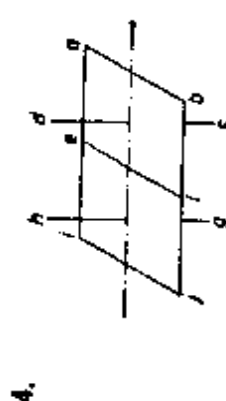
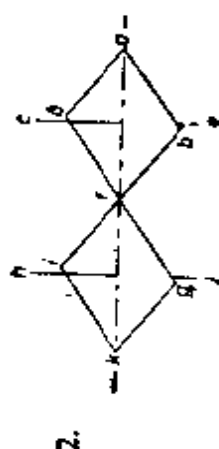
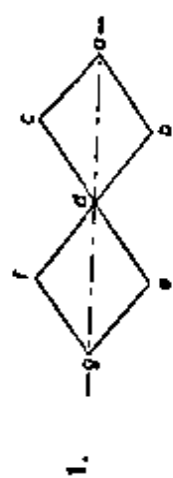
二(μ -羟)· μ -亚硝酸根(O, N)·六氨合二钴(3+)离子

二(μ -羟)· μ -亚硝酸根(O, N)·六氨合二钴(III)离子



四(μ_3 -碘)·四[三甲基合铂(IV)]





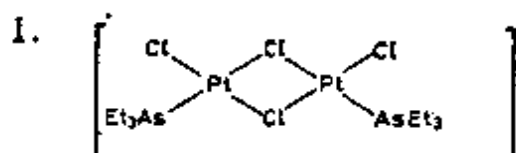
氯化 μ_3 -氧 · 六 $[\mu$ -乙酸根 (O, O')] 合三铬 (I+)

氯化 μ_3 -氧 · 六 $[\mu$ -乙酸根 (O, O')] 合三铬 (III)

10.612 复杂构型的位标

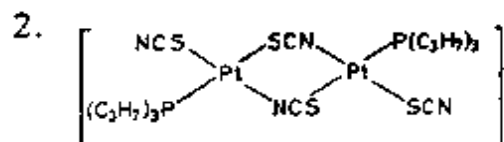
复杂构型的位标顺序规定见 69 页图: (每个结构的右边为原子平面图)

例:



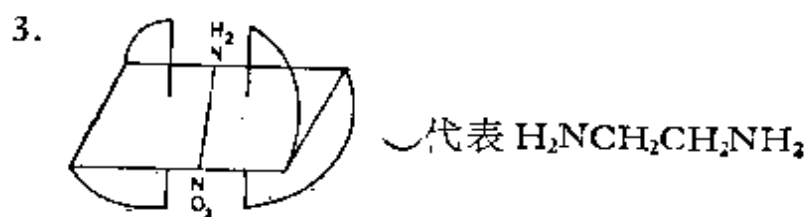
二 (μ -氯) · ac -二氯 · 二(三乙肿)合二铂

二 (μ -氯) · ac -二氯 · 二(三乙肿)合二铂 (II)



二 (μ -硫氰酸根- S, N) · af -二 (硫氰酸根) · 二(三丙基磷)合二铂

二 (μ -硫氰酸根- S, N) · af -二 (硫氰酸根) · 二(三丙基磷)合二铂 (II)



e - μ -氨基 · f - μ -硝基 · ac, bd, gj, hi -四 (乙二胺) 合二钴(4+)离子

e - μ -氨基 · f - μ -硝基 · ac, bd, gj, hi -四 (乙二胺) 合二钴 (III) 离子

其对映体是:

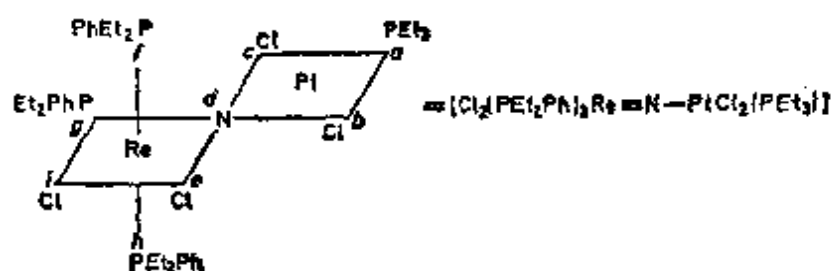
e - μ -氨基 · f - μ -硝基 · ad, bc, gi, hj -四 (乙二胺) 合二钴(4+)离子

e - μ -氨基 · f - μ -硝基 · ad, bc, gi, hj -四 (乙二胺) 合二

钴(III)离子

10.613 当多核配合物中含有两个或两个以上不同的中心原子时,则将其元素符号的英文字母居先的中心原子的位置(按10.612)作为位标a。如果位于两端的中心原子相同,则由其次一个中心原子来决定哪一端作为位标a。如果中心原子是对称的,则按配体元素符号字母的顺序来决定位标a。最后按中心原子在化合物中的顺序,从具有位标a那端依次列出。

例:

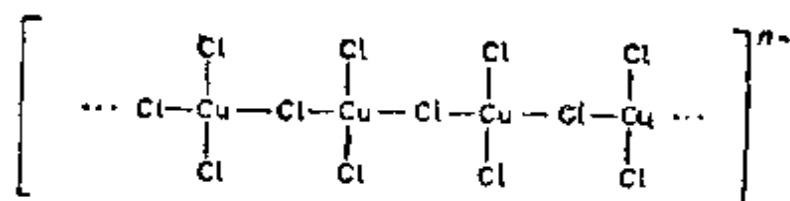


bcei-四氯·*d-μ*-氮根·*a*-(三乙基膦)·*fgh*-三(二乙苯基膦)
合铂铼

bcei-四氯·*d-μ*-氮根·*a*-(三乙基膦)·*fgh*-三(二乙苯基膦)
合铂(II)铼(V)

10.62 桥联链结构化合物

(1) 桥联结构可以无限延伸形成链(catena)时,则按重复单位来给该化合物命名。如组成为 CsCuCl_3 的化合物其阴离子可以无限延伸。

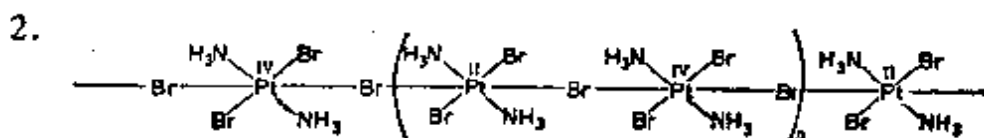
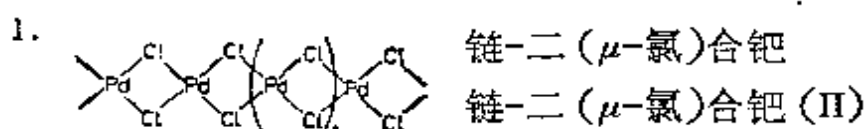


故其化学式可以用 $(\text{Cs}^+)_n[(\text{CuCl}_3)_n]^{n-}$ 来表示。命名为

链- μ -氯·二氯合铜(II)酸铯。

如果其结构式尚属可疑,就应作为复盐,称为氯化铯铜(II)

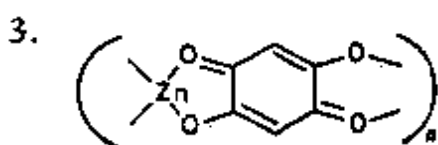
例:



链- μ -溴·二溴·二氨合铂

链- μ -溴·二溴·二氨合铂(II, IV)

(2) 含有不同配位原子的桥联基团连接两个中心原子而形成链时,应将配位原子的元素符号放在桥联基团名称之后。



链- μ -[对苯醌-2,5-二酚根(2-)-O, O':O'', O''']合锌

链- μ -[对苯醌-2,5-二酚根(2-)-O, O':O'', O''']合
锌(II)

13.7 含金属-金属键的化合物

10.71 中心原子之间仅有金属键连接

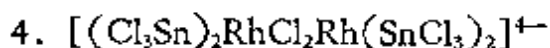
(1) 含有金属键而具有对称结构的化合物应用倍数词头命名(见例1, 2)。

(2) 若为非对称结构则将其其中一个中心原子及其配体一起作为另一个中心原子的配体(词尾用“基”)来命名。这另一个作为主要的中心原子是其元素符号的英文字母居后的金属。

例:



二〔四溴合铼(III)酸根〕



二(μ -氯)·双[二(三氯锡基)合铊酸根](4-)离子

二(μ -氯)·双[二(三氯锡基)合铊(I)酸根]离子

5. $[(C_6H_5)_3AsAuMn(CO)_5]$

五羰基·[(三苯基胂)金基]合锰

10.72 中心原子之间既有桥联基团又有金属键连接

当相同两个中心原子之间既有桥联基团又有金属键连接时,则此化合物应按桥联化合物来命名,并将金属—金属键的元素符号括在括弧中缀在整个名称之后。

例:

1. $(OC)_3Co(CO)_2Co(CO)_3$

二(μ -羰基)·二(三羰基合钴)(Co—Co)

2. $\eta-C_8H_{10}(CO)Co(CO)_2Co(CO)-\eta-C_8H_{10}$

二(μ -羰基)·二[羰基- η -(1,3,6-环辛三烯)合钴](Co—Co)

10.73 同原子簇化合物

有些金属原子簇,除其金属间有键连接外,还有一些非金属原子团(配体),与该金属原子簇紧密地缔合,金属原子与配体间键的性质则按照桥键和一般键的习惯来命名。此外,在金属原子之前还必需对该原子簇的几何形状(如三角(triangular),四方(quadrate),四面(tetrahedral),八面(octahedral)等)加以说明。

例:

1. $Os_3(CO)_{12}$ 十二羰基合-三角-三铱

2. $Cs_3[Re_3Cl_{12}]$ 十二氯合-三角-三铼酸(3-)铯

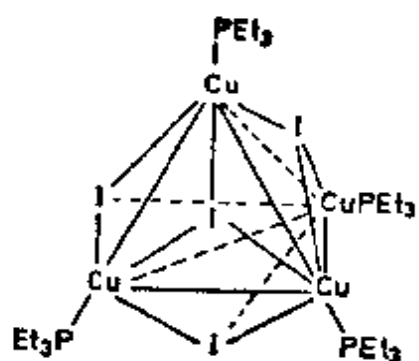
3. B_4Cl_4 四氯合-四面-四硼

4. $[Nb_6Cl_{12}]^{2+}$ 十二(μ -氯)合-八面-六铌(2+)离子

5. $[Mo_6Cl_8]^{4+}$ 八(μ_3 -氯)合-八面-六钼(4+)离子

6. B_8Cl_8 八氯合-十二面-八硼

7. $Cu_4I_4(PEt_3)_4$



四(μ_3 -碘)·四(三乙基膦)合-四面-四铜

四(μ_3 -碘)·四(三乙基膦)合-四面-四铜(I)

中国化学会

有机化学命名原则

1980

前 言

我国有机化学的命名法,以往一直沿用《有机化学物质的系统命名原则》(1960)。随着有机化学学科的发展,该《原则》已经不能适应当前的需要,为此,中国化学会专门成立了“有机化学名词小组”,进行增补和修订。

从1978年开始,“小组”约请有关专家,分别对1960年《原则》中每个章节进行审查,并参考国际纯化学和应用化学联合会(IUPAC)1979年公布的《有机化学命名法》*提出增修订意见,曾两次印制《草案》分送国内大专院校、科研单位和有关专家征求意见。得到了大力支持。在此基础上召开了三次全国性的座谈会和多次小型专题讨论会,广泛听取化学界同志们的意见。而后参加修订工作的专家们,根据座谈会的精神,分别就各章节的修订意见写了文章,并在《化学通报》1980年8—12期上连载,再次征求化学界同志们的意见,最后由“有机化学名词小组”集体审查定稿。

《有机化学命名原则》(1980)重点修订了“化学介词”、“基的命名”、“支链和取代基的列出顺序”、“杂环化合物”的命名。扩充了“立体化学”的内容,增加了“变丰化合物”和“天然化合物”等章节。

参加起草和修订工作的有:王序、邢其毅、汪猷、黄耀曾、王葆仁、张滂、王积涛、梁晓天、黄文魁、陈光旭、胡宏纹、周维善、刘铸晋、屠传忠、王大琛、陆仁荣、程铁明、陈淑凤、王宝瑄等同志。

在修订过程中,得到了本学会杨石先理事长和柳大纲副理事长的热情关注。有关单位还曾多次组织小型讨论会,许多专家和专业工作者提供了宝贵的审查意见。谨此一并致谢。

《有机化学命名原则》(1980),虽经多次讨论,但由于有机化

* Nomenclature of organic chemistry sections A, B, C, D, E, F and H 1979 edition.

学本身内容繁杂所定原则也不可能把全部内容包括进去，有些原则还要适当照顾长期使用的习惯，有些原则还要通过在实践中进行检验。我们希望全国化学界的同志们，随时提出修改意见。以使《原则》日臻完善。

中国化学会有机化学名词小组

1982 年 2 月

1. 总 则

从有机化学物质的结构出发,在对数目庞大的有机化合物进行命名时,尽可能地规定一些可以遵循的原则,从而使化合物名称和结构不致混淆,这样制定的化合物名称代表了它的组成和结构,且具有相应的系统性。

1.1 基本方法

(1) 将有机化合物的母体——链烃、环烃及杂环——系统地制定名称或给予特定名称。

(2) 规定母体的位次编排法。

(3) 将官能团、取代基以及由母体化合物所形成的“基”、“亚基”、“次基”都给出规定的名称。

(4) 规定立体化学中的命名方法。

(5) 规定一些代表结构组分结合关系的化学介词,以及代表结构异构的形容词。

(6) 归纳了天然物命名的基本原则。

具体命名的方法是以母体名称作为主体名,用介词连缀上取代基或官能团的名称,并按规定的顺序注出取代基或官能团的位次,而得到化合物的名称。

在有机化合物命名还未能实现一物一名的情况下,从结构的观点出发,多数有机化合物可以有几个名称,而命名原则要求选用较简便明确的名称(包括习惯使用的俗名)。

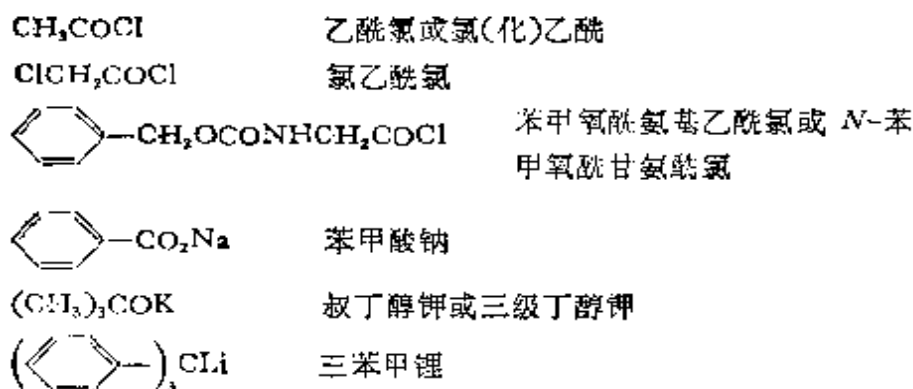
1.2 化学介词

化学介词是代表化合物中结构组分结合关系的连缀词。有机化学物质命名使用八个介词。在化合物的命名和结构关系不会混

消时，介词往往可以省略。在可省略的情况下，为了说明的目的，介词被括在括号内。

化——有机化合物被视为两个基之间的化合所用的介词。这个介词往往是省略的。

例：

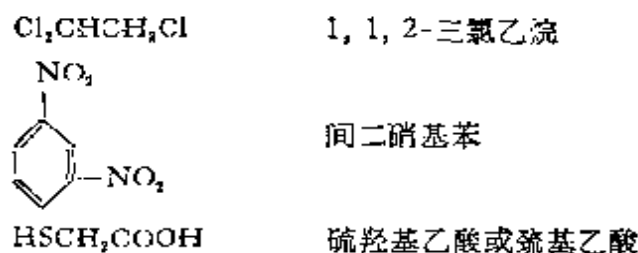


单取代的衍生物可以这样命名，但在多取代的情况中，命名是困难的。可作为取代产物命名，见介词[代]。

代——有机化合物作为一个母体化合物的氢、其它原子或基团被置换而命名所用的介词，使用时往往可以省略。

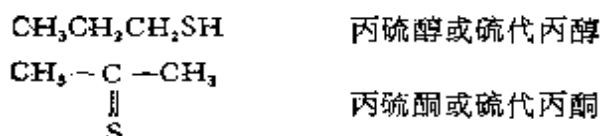
(1) 取代碳原子上的氢：

例：



(2) 硫置换碳原子上的氧原子。许多硫化物以相应的氧化物为母体，经硫置换而命名，硫的结构与原来的氧相同。

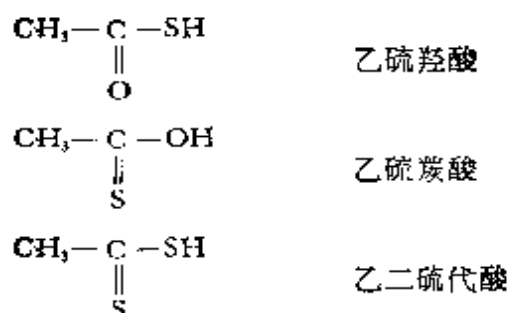
例：



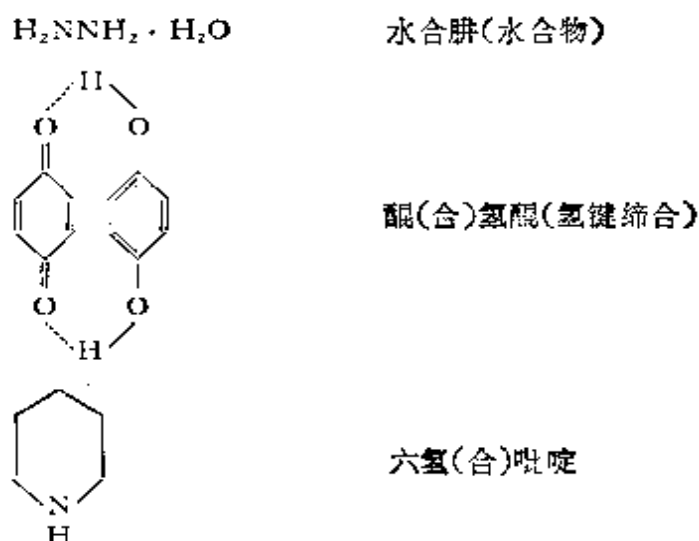
(3) 硫置换羧基碳原子上的氧原子。羧酸分子中的羟基或羧

基上的氧原子分别被硫原子取代，可在硫字之后加上羟或羧字来命名，硫羟或硫羧应位于序数词(甲、乙、丙、……)之后，如果位于序数词之前，则是置换了碳原子上的氢原子(参见(1))。

例：



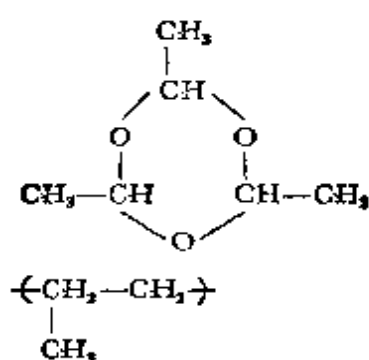
合——有机化合物被视为加成产物而命名所用的介词，加成的双方可以是分子或其中一方是基。



介词[化]和[合]是可以通用的，因为双键可以看作为基，但在它们之间，以使用合字较为合理。

聚——相同或不相同分子的聚合物命名时所用的介词。命名时在单体名称或链节名称之前冠以聚字。在较复杂的情况下，单体或链节名称需要加以括号括出，若已知聚合物的聚合程度时，在聚字前标出聚合数目。

例：

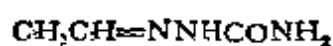


三聚甲醛

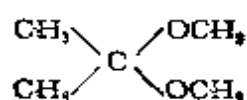
聚丙烯或聚 1,2-亚丙基

缩——相同或不相同的分子之间失水、醇、氨等小分子而形成的化合物命名时所用的介词。

例：



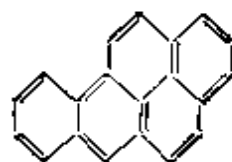
乙醛缩氨基脲



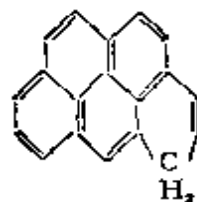
丙酮缩二甲醇

并——复杂的碳环或杂环化合物被视为由两个或多个环系之间通过两位或多位相互结合形成稠环所用的介词。

例：



苯并[a]蒽



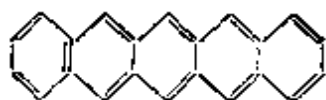
5H-苯并[cd]芘

线型的多苯并合的芳香体系除“萘”和“蒽”有特定名称外，以并苯命名，同时标出苯环的数目。

例：



并四苯

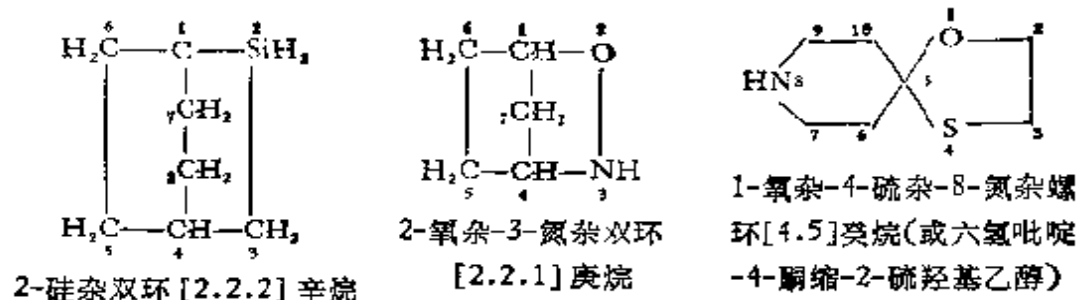


并五苯

杂——用于 von Baeyer 的杂环命名法的介词。简单的杂环已

有特定名称,许多较复杂的多环杂环体系可以用并合的杂环命名。但是仍有一些杂环化合物的命名难以包括在内,主要是多环的和螺环的杂环体系。*von Baeyer* 命名是以相应的碳氢化合物为母体,定位以后,凡是碳氢基团为杂原子代替时,分别以位数和氧杂(—O—)、硫杂(—S—)、氮杂(—NH—)或硅杂(—SiH₂—)来命名。

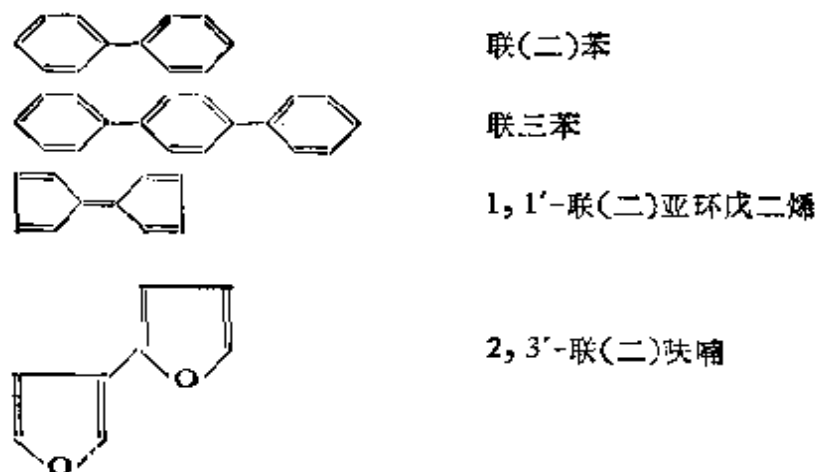
例:



以上的例子说明,定位顺序除遵守母体环系的定位规定外,还要遵守杂原子氧、硫、氮命名的优先定位次序。

联——相同的环烃或杂环彼此以单键或双键直接相连,而形成集合环所用的介词。

例:

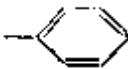
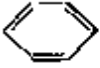

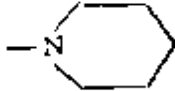
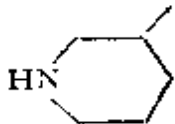


1.3 基的命名

从结构出发,命名中的基被区别为基(单价基)、亚基(双价基)和次基(三价基)。这一规定与无机化学物质命名中不同氧化级的酸类的命名相对应。

1.31 基：一个化合物从形式上消除一个单价的原子或基团构成成为基，必要时加以定位，定位数位于基名之前。

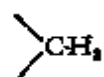
例：

| | |
|--|--------------|
| $-\text{CH}_3$ | 甲基 |
| $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ | 丙基 |
| $-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$ | 异丙基 |
| $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ | 丁基 |
| $-\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$ | 异丁基 |
| $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ -\text{CHCH}_2\text{CH}_3 \end{array}$ | 2-丁基或 1-甲基丙基 |
| $-\text{C}(\text{CH}_3)_3$ | 叔丁基或三级丁基 |
|  | 苯基 |
| $-\text{CH}_2$  | 苯甲基或苄基 |
| $-\text{CH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$ | 烯丙基 |
| $-\text{CH}=\text{CHCH}_3$ | 丙烯基 |
| $-\text{CH}_2\text{COOH}$ | 羧甲基 |
| $-\text{COCH}_3$ | 乙酰基 |
| $-\text{N}=\text{N}$  | 苯偶氮基 |
| $-\text{NH}_2$ | 氨基 |
| $-\text{NHNH}_2$ | 肼基 |
| $-\text{SH}$ | 巯基或硫基 |
|  | 1-六氢吡啶基 |
|  | 3-六氢吡啶基 |
| $-\text{CH}_2\text{N}(\text{CH}_3)_2$ | 二甲氨基(基)甲基 |
| $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ | 2-羟乙基 |

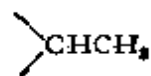
1.32 亚基：一个化合物从形式上消除两个单价或一个双价的原子或基团构成成为亚基。亚基有两种不同的结构：

(1) 两个价集中在一个原子上时，一般不要求定位，但有选择时以该原子的序数定位。

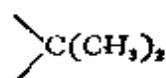
例：



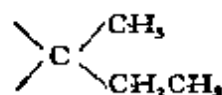
亚甲基



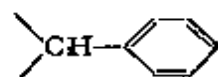
亚乙基



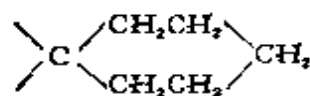
亚异丙基



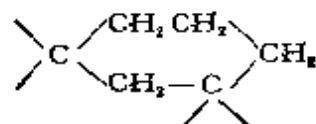
1-甲基亚丙基



苯亚甲基(亚苄基)



亚环己基



1,3-双亚环己基



亚氨基

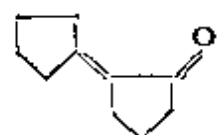
在以上的定位中,无定位数的就是 1-位;定位数要求放在亚字前。胂基、肟基、环氧基等已习惯上通用,不再更动为亚基名称。

在结构中,亚基可以与另一原子或分别与两个相同的或不不同的原子结合,这一结合在必要时可用定位数字规定。

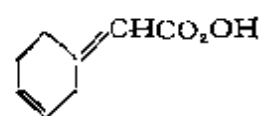
例:



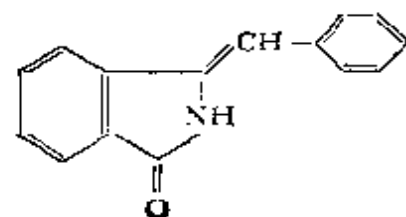
亚甲基丙二酸二乙酯



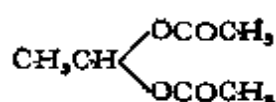
α -(或 2-)亚环戊基环戊酮



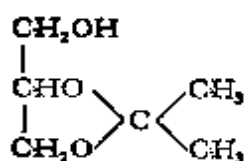
亚-3-环己烯基乙酸



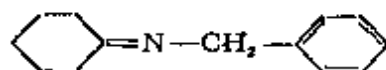
5-苯亚甲基-3,4-苯并-二氢吡咯酮



亚乙基二乙酸酯或二乙酸亚乙(基)酯



1,2-O-亚异丙基甘油



苯甲亚氨基环己烷或N-亚环己基苯胺

(2) 两个价分别在不同的原子上时,一般要求定位,定位数放在基名之前。

例如:

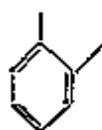


1,2-亚乙基或二亚甲基

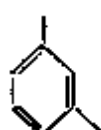


1,6-亚己基或六亚甲基

多亚甲基相当于英文命名中的 polymethylene,但应使用定位的亚基。



邻亚苯基



间亚苯基



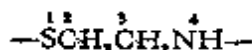
对亚苯基

亚苯基相当于英文命名中的 phenylene。总之,亚基相当于英文命名中的字尾 -ylene 或 -ylidene。亚基还可以扩展用于含杂原子的基团。与杂环化合物的定位规定一致,按 O、S、N、C 的先后次序。

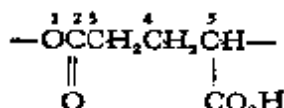
例:



1,3-亚乙氧基

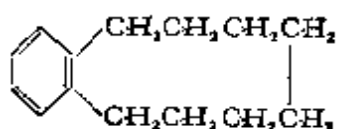


1,4-亚乙硫醇氨基

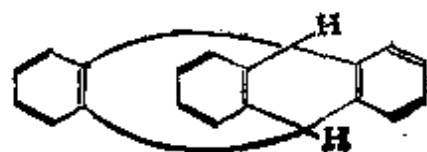


1,5-亚(5-羧基)丁酰氧基

下面是一些命名的实例:

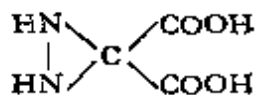


邻-1,8-亚辛基苯或1,8-(邻亚苯基)辛烷或苯并环辛烷

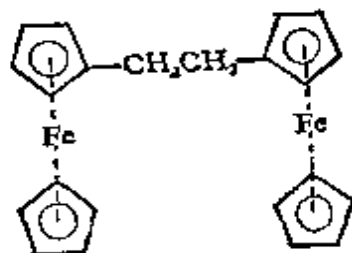


9,10-邻亚苯基-

9,10-二氢蒽

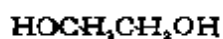


1,2-亚胂基丙二酸

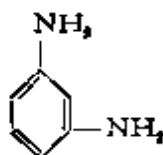


1,2-亚乙基双二茂铁

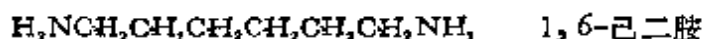
已有更简便的命名时可不用亚基命名,例如:



乙二醇



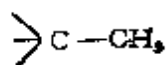
间苯二胺



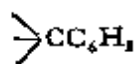
1.33 次基: 一个化合物在形式上消除三个单价的原子或基团构成为次基。命名中使用的次基限于三个价集中在一个原子上的结构。三个价分别位于两个原子(一个单价和一个二价)和分别在三个原子上的结构可以分别以亚基和一般的系统命名来命名。常见的次基为:



次甲基



次乙基

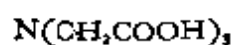


苯次甲基

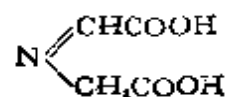


次氨基

次基相当于英文命名中的 -ylidine 或 -ylidyne. 以次基命名的例子为:



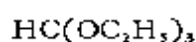
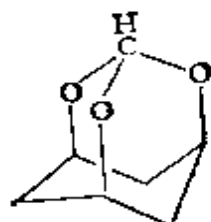
次氨基三乙酸或三(羧甲基)胺



次氨基二乙酸

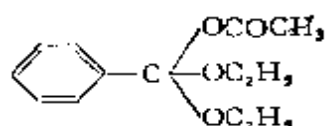
这一类化合物中,有些在习惯上已被称为原甲酸酯,不需要以次甲基命名;而另一些既不便于用原酸命名,又不使用次基命名,则可命名为取代烃。

例:



1,3,5-O-次甲基-顺,顺-1,3,5-环己三醇或顺,顺-1,3,5-环己三醇原甲酸酯或6,8,10-三氧杂三环[3.3.1.1^{3,7}]癸烷或6,8,10-三氧杂金刚烷

原甲酸乙酯



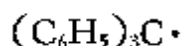
二乙氧基乙酰氧基苯甲烷

当碳的三个价与另一碳原子连接构成炔键时,应命名为炔不宜以次基命名。

1.34 游离基: 一个化合物从形式上消除一个单电子原子或基团而构成一个带有未成键的单电子基,命名为游离基(或自由基)。



甲基游离基



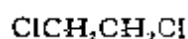
三苯甲基游离基

1.4 名称中使用的符号

1.41 阿拉伯数字*

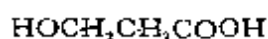
1、2、3、4、5……用来给主链或母体环编号,同时也用来表示取代基或官能团的位次。在命名中,位次符号和名称之间须加“-”半字线。读时,可加上一个“位”字。如一位、二位、三位等。

例:



1,2-二氯乙烷

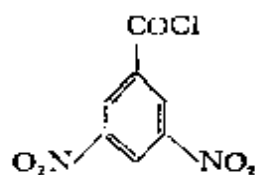
读作:一、二位二氯乙烷



3-羟基丙酸

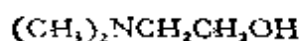
读作:三位羟基丙酸

* 螺、桥烃命名中,用阿拉伯数字表示螺原子间或桥上的碳原子数目,详见2.5和2.6节。



3, 5-二硝基苯甲酰氯

读作:三、五位二硝基苯甲酰氯



2-(二甲氨基)乙醇

读作:二位二甲氨基乙醇

1.42 汉文数字和天干

一、二、三……和天干甲、乙、丙……癸,用来表示取代基或原子等的个数(见 2.11 节)。

1.43 拉丁字母

a, b, c, d, \dots 主要用来表示稠环化合物中,被并合的母体环系边的位置(边数)。参阅 2.42 节。

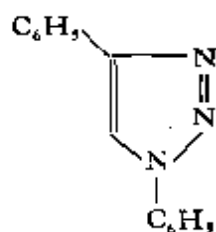
1.44 希腊字母

$\alpha, \beta, \gamma, \dots, \omega$, 习惯上有两种含义。(1) 用来编号,标明位次,情况类同于阿拉伯数字。但要注意的是用于酸和杂环时 α 位相当于第二位, β 位相当于第三位,依次类推。此外, ω 常用来指端位;(2) 在立体化学中,常用来表示空间关系或立体异构。

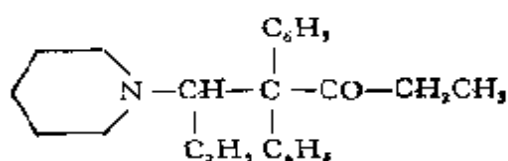
1.45 标点符号

名称中的标点符号有逗点和圆点两种,阿拉伯数字之间,用“右下角逗点”隔开,则该数字指示位次;若用“右下角圆点”隔开并加方括号,则此处数字表示原子数目。即化合物名称中数字之间的不同标点符号,指示了数字的不同含义。

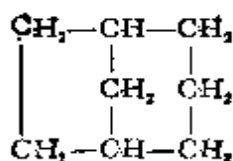
例:



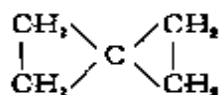
1, 4-二苯基-1, 2, 3-三唑



4, 4-二苯基-5-(1-六氢吡啶基)
-3-庚酮



二环[3.2.1]辛烷

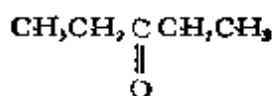


螺[2.2]戊烷

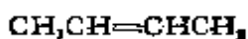
1.5 取代基位次在名称中的位置

取代基的位次一律标示在取代基名称或化合物名称之前。

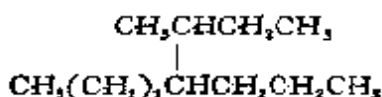
例:



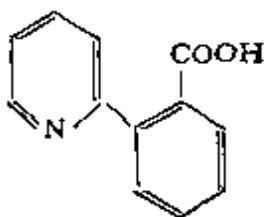
3-戊酮



2-丁烯



4-(1-甲基丙基)庚烷



2-(2-吡啶基)苯甲酸或 2-(α -吡啶基)苯甲酸

2. 烃

2.1 烃的命名

2.1.1 碳原子数目的表示法

链烃分子内碳原子数目在十以内时,用天干表示;在十以外,则用汉文数字表示。

名称举例:

n = 碳原子总数

| n | 名称 | 英文名称 | n | 名称 | 英文名称 |
|-----|----|---------|-----|----|---------|
| 1 | 甲烷 | methane | 5 | 戊烷 | pentane |
| 2 | 乙烷 | ethane | 6 | 己烷 | hexane |
| 3 | 丙烷 | propane | 7 | 庚烷 | heptane |
| 4 | 丁烷 | butane | 8 | 辛烷 | octane |

| n | 名 称 | 英文名称 | n | 名 称 | 英文名称 |
|----|-----|-------------------|----|------|----------------|
| 9 | 壬烷 | nonane | 21 | 二十一烷 | heneicosane |
| 10 | 癸烷 | decane | 22 | 二十二烷 | docosane |
| 11 | 十一烷 | undecane | 23 | 二十三烷 | tricosane |
| 12 | 十二烷 | dodecane | 30 | 三十烷 | triacontane |
| 13 | 十三烷 | tridecane | 31 | 三十一烷 | hentriacontane |
| 20 | 二十烷 | icosane(eicosane) | 32 | 三十二烷 | dotriacontane |

在用数字表示时,除烷属烃可以略去碳字外,其它各属烃均应缀有碳字。

例:



2.12 烃的词尾

(一)饱和烃的词尾用烷,相当于英文名称词尾-ane。

例:



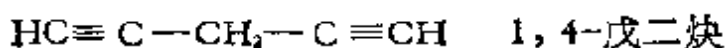
(二)含有碳碳双键的烃,用烯作为词尾,相当于英文名称词尾-ene。双键不止一个时,其数目用基数词二、三、四……等表示,词尾则为几烯。

例:

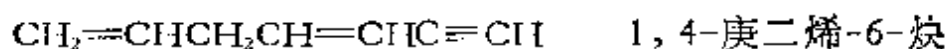


(三)含有碳碳三键的烃,词尾用炔,相当于英文名称词尾-yne。叁键不止一个时,其数目用基数词二、三、四……等表示,词尾则为几炔。

例:



同时含有双、叁键的烃^{*}，词尾为“几烯几炔”，若其中双键或叁键只有一个，则“一”字从略。



不管炔键在主链上的位次如何，炔总是放在名称的最后。

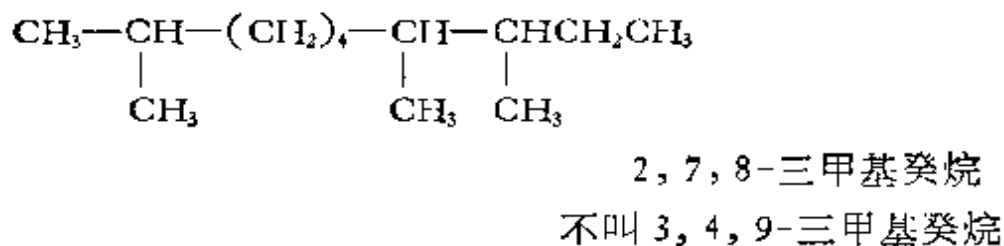
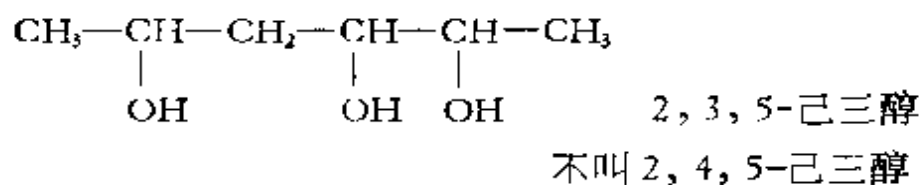
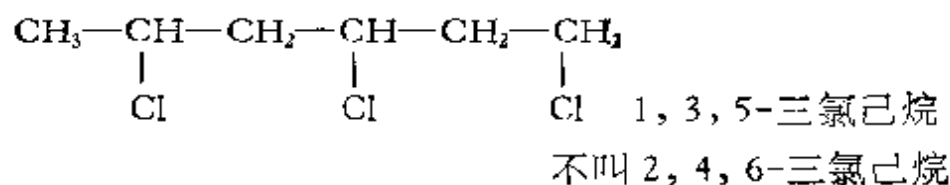
2.13 碳链的编号

(一) 选定编号的总则

链烃、对称环烃以及它们的衍生物，在有几种编号的可能时，应当选定使官能团及取代基具有“最低系列”的那种编号。

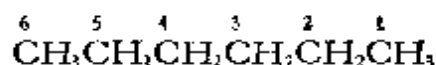
所谓“最低系列”指的是碳链以不同方向编号，得到两种或两种以上的不同编号的系列，则顺次逐项比较各系列的不同位次，最先遇到的位次最小者，定为“最低系列”。

例：



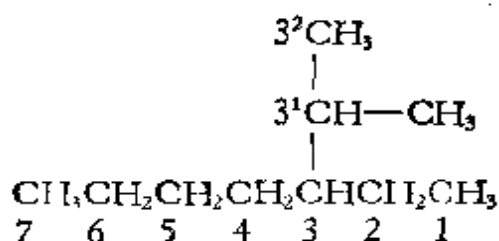
(二) 链烃的位次编号：

链烃中的主链从一端向另一端编号，号数用 1, 2, 3, 4……等表示，读成 1 位，2 位，3 位，4 位等。



* 同时含有双、叁键的烃，按习惯命名为“几烯几炔”，主链编号另有规定，见 2.13 节。

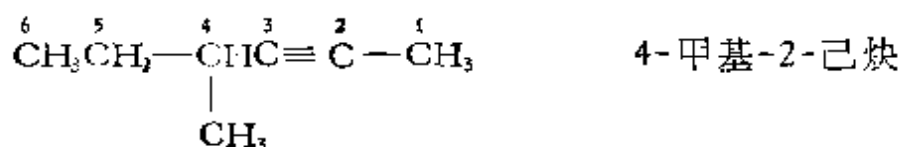
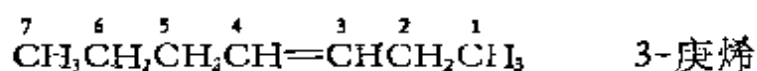
支链从和主链啣接的地方起编号,可以用带撇数字编号,也可以顺次用 n^1, n^2, n^3 等来编 (n 为啣接处主链碳原子的编号),读成 n 附 1 位, n 附 2 位, n 附 3 位等等。



(三)双、叁键的编号:

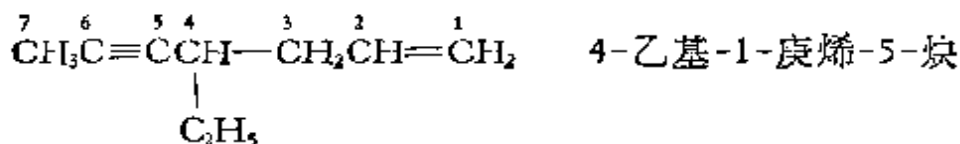
(1) 只含有一个双键或叁键的不饱和烃编号,将尽可能低的数字编给双键或叁键。

例:



(2) 同时含有双、叁键的不饱和直链无环烃,链的编号循最低系列原则给双、叁键以尽可能低的数字,一般不考虑双、叁键所在的位次大小,所以有时炔的编号低于烯。

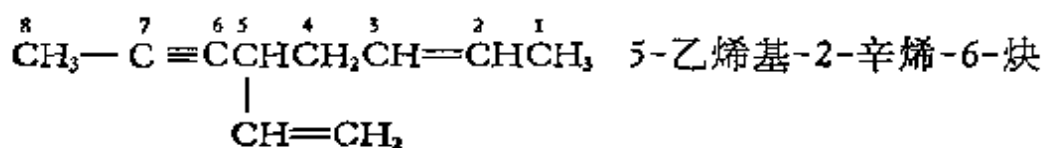
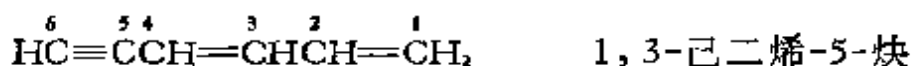
例:



但当双、叁键处在相同的位次,即编号尚有选择时,则给双键以最低编号。

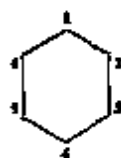
例:



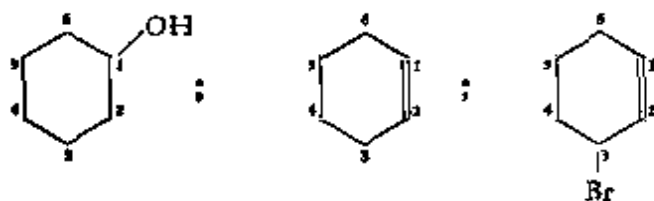


(四) 对称简单碳环的编号

结构对称的单环烃,其位次可以从任何一个碳原子算起,按顺时针编号。

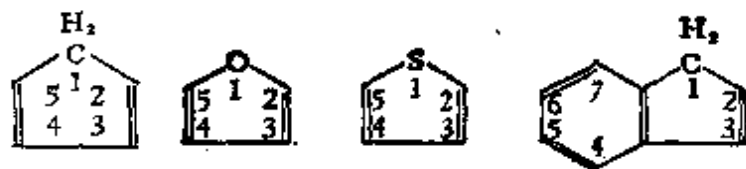


被取代的简单碳环的编号,按编号总则精神,从被取代的碳原子起始。

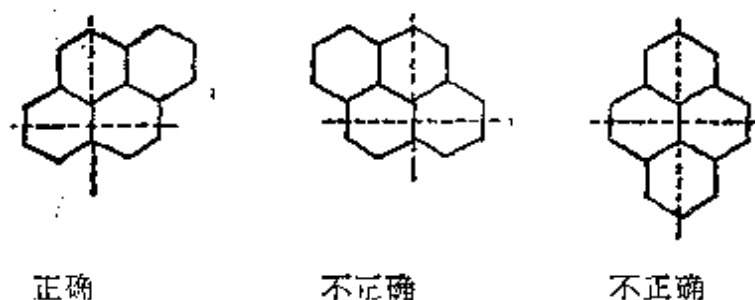


(五) 结构不对称的单环烃和一般稠环烃

结构不对称的单环烃和一般稠环烃均采用固定的编号法,其所衍生的杂环也沿用这种固定的编号。

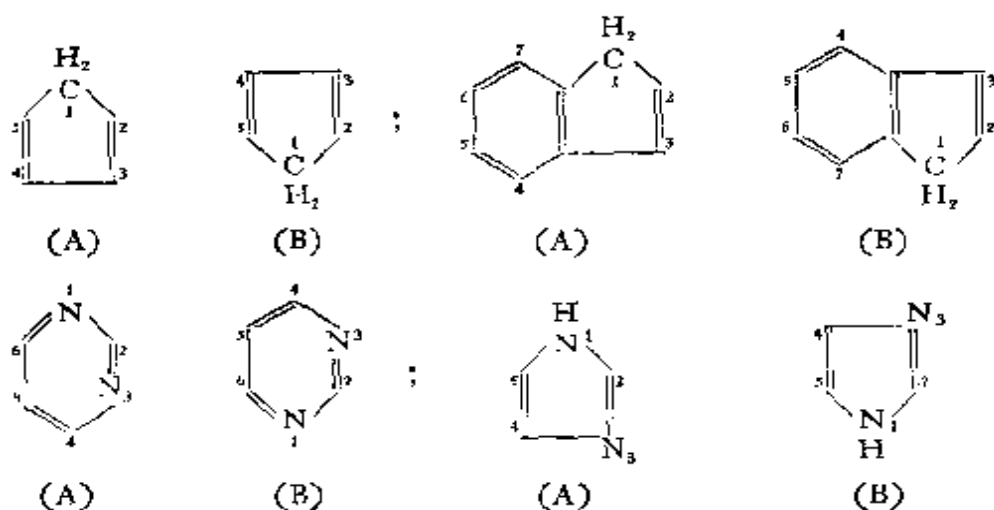


【注】按规定,一般单边互稠环结构式的画法是:(1)将尽可能多的环列在一横排上。(2)将尽可能多的环列在右上象限。若有两种或多种画法符合上述要求,则选择左下象限环数最少的一个画法。



此时，编号就自右上角第一个环最右方的一个自由角开始按顺时针方向进行。当然在可能的情况下，还要尽量给予杂原子和额外氢所在原子以最小的编号。（见第5章）

单环和单边相稠的双环最好也按上述规定的逻辑画结构式（见例A）并以右上角为第一位，按顺时针的方向进行编号。有时由于采用了不同的习惯画法（见例B），因而编号的方向就相反。不过，这只是画法不同，实际上编号是一样的。



2.2 链 烃

2.21 直链烃

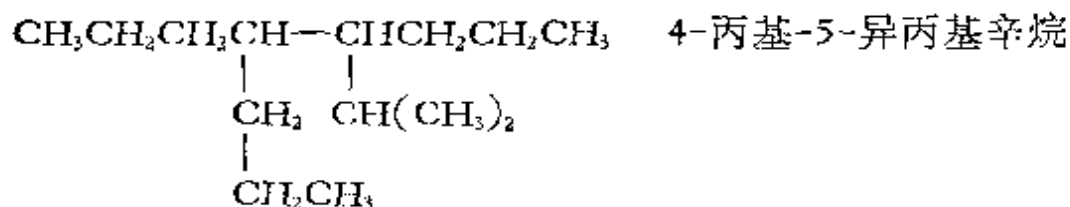
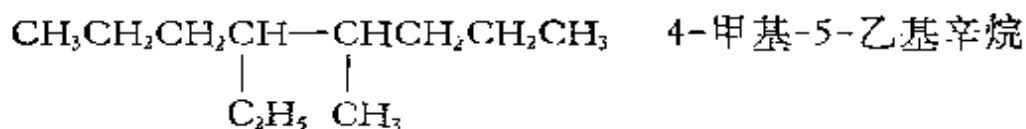
直链烃命名是在表示碳原子数目的基数词后面缀上其相当的词尾来命名（见2.1节）。

2.22 支链烃

（一）支链烃视为直链烃的衍生物。一般是将结构式中最长的直链作为主链，把它的名称作为主体名，再注上支链或取代基名称

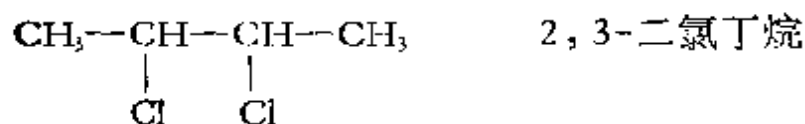
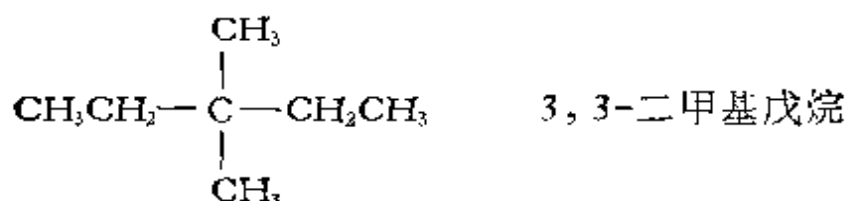
及其所在主链的位次作为词头来命名。

例:

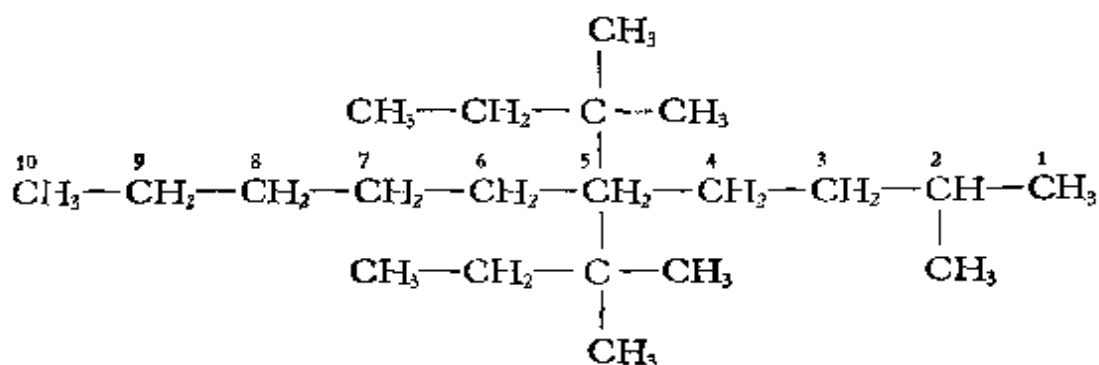


(二)相同的支链或取代基,用相同合并的原则,以相应的倍数(即基数)词二、三、四等来表示。

例:



(三)被取代了的支链,它们的全名可放在括号中或用带撇的数字来标明侧链中的碳原子等两种表示形式。

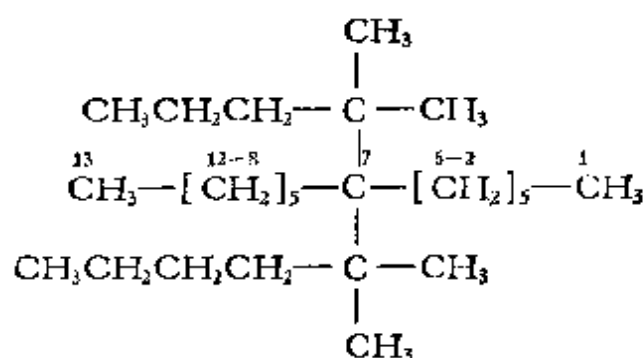


(1) 用括号而不用带撇的数字:

2-甲基-5,5-二(1,1-二甲基丙基)癸烷

(2) 用带撇的数字

2-甲基-5,5-二-1',1''-二甲基丙基癸烷



(1) 用括号而不带撇的数字

7-(1, 1-二甲基丁基)-7-(1, 1-二甲基戊基)十三烷

(2) 用带撇的数字

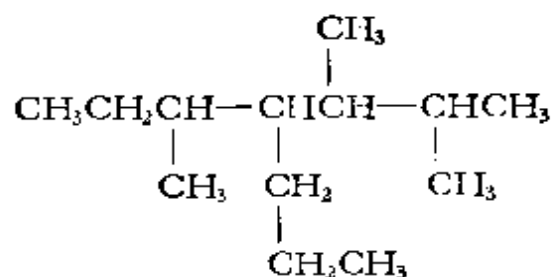
7-1', 1'-二甲基丁基-7-1'', 1''-二甲基戊基十三烷

2.23 主链的择定

(一)一般的饱和支链无环烃,若没有选择余地时,均应以最长的作为主链。

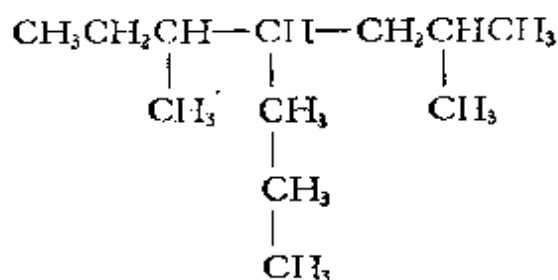
(二)当一个饱和支链无环烃具有相同长度的链可作为主链时,则选择的顺序为:

(1) 具有侧链数目最多的链。



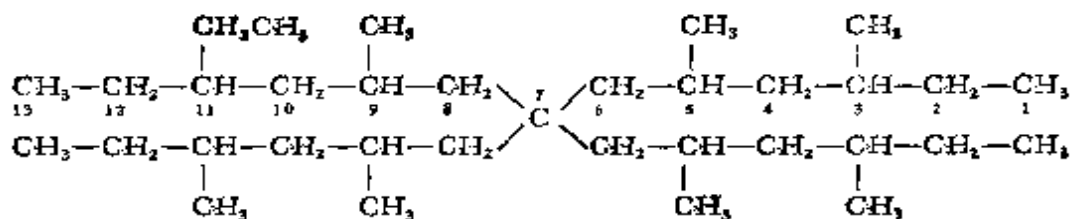
2, 3, 5-三甲基-4-丙基庚烷

(2) 侧链具有最低位次的链。



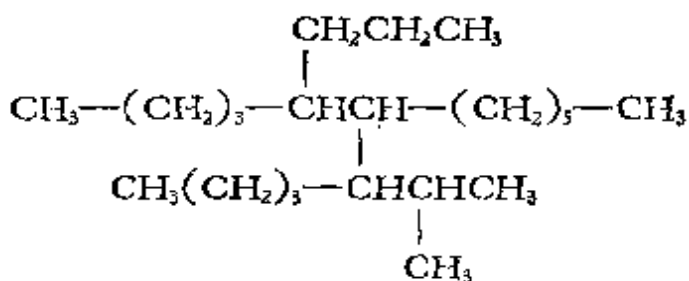
2, 5-二甲基-4-(1-甲基丙基)庚烷

(3) 在较短的侧链中,具有碳原子数目最多的链*。



3, 5, 9-三甲基-11-乙基-7, 7-二(2, 4-二甲基己基)十三烷
或 3, 5, 9-三甲基-11-乙基-7-2', 4'-二甲基己基-7-2'', 4''-二
甲基己基十三烷

(4) 具有侧分支最少的链。



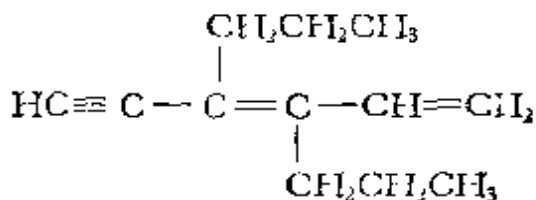
5-丙基-6-(1-异丙基戊基)十二烷

(三) 不饱和链烃的主链, 应选择含有双、叁键最多而链又尽可能最长者; 若含有两个或更多的侧链, 可作为不饱和键含量最多的链进行选择时, 则依下列标准顺次选择:

(1) 碳原子数目最多者。

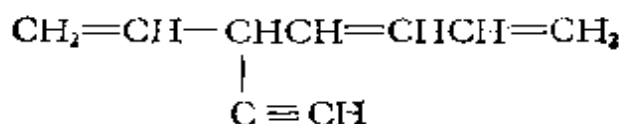
(2) 若碳原子数目相同, 则选择双键数目最多者。

例:

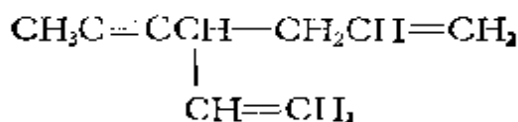


3,4-二丙基-1,3-己二烯-5-炔

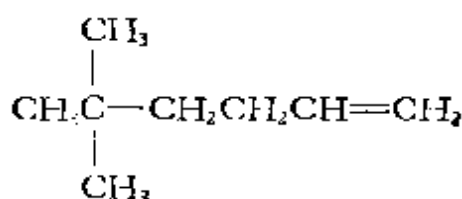
* 下面的例子中有两条可供选择的等长主链，两者都在相同的位置上具有六个侧链，这就要比较两种选择方法中，按逐渐增加的顺序排列的各侧链碳原子数，第一种选择为 1, 1, 1, 2, 8, 8。第二种选择为 1, 1, 1, 1, 8, 9。根据“较短的侧链中，具有碳原子数最多的链”的规定，当逐项比较时，对最先遇到的大小不同的侧链，应择其较大的侧链。例中两种选择的第四项即 2 大于 1，故选用第一种。



5-乙炔基-1, 3, 6-庚三烯



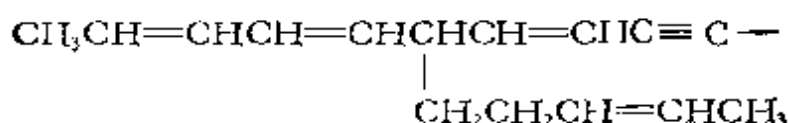
4-乙烯基-1-庚烯-5-炔



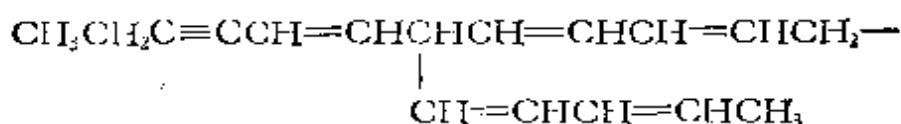
2, 2-二甲基-1-己烯

(四)若一个基的主链有选择余地时,则顺次选择有(1)双、叁键数目最多者;(2)碳原子数目最多者;(3)双键数目最多者。

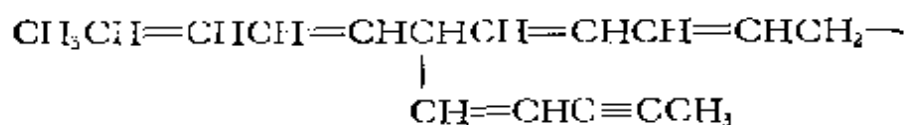
例:



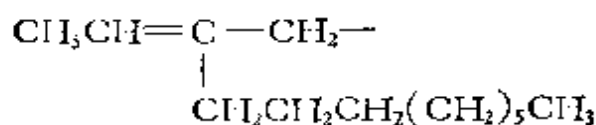
5-(3-戊烯基)-3, 6, 8-癸三烯-1-炔基



6-(1, 3-戊二烯基)2, 4, 7-十二碳三烯-9-炔基



6-(1-戊烯-3-炔基)-2, 4, 7, 9-十一碳四烯基



2-壬基-2-丁烯基

2.24 表示链异构的形容词

表示链异构的形容词计有: 正、异、新、伯、仲、叔、季七个

字。

[正]: 直链烃以及官能团位于直链烃末端的化合物都用正字。在不会误解时,常予省略。

例:

| | |
|--|-----------|
| $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ | (正)丁烷 |
| $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{OH}$ | 正丁醇 |
| $\text{H}_2\text{N}-\text{CH}_2-(\text{CH}_2)_4-\text{COOH}$ | 6-氨基(正)己酸 |
| $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CHO}$ | 正戊醛 |
| $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$ | 正丁基 |

[异]: 直链结构一末端带有两个甲基的特定结构,命名为异某烃或异××。

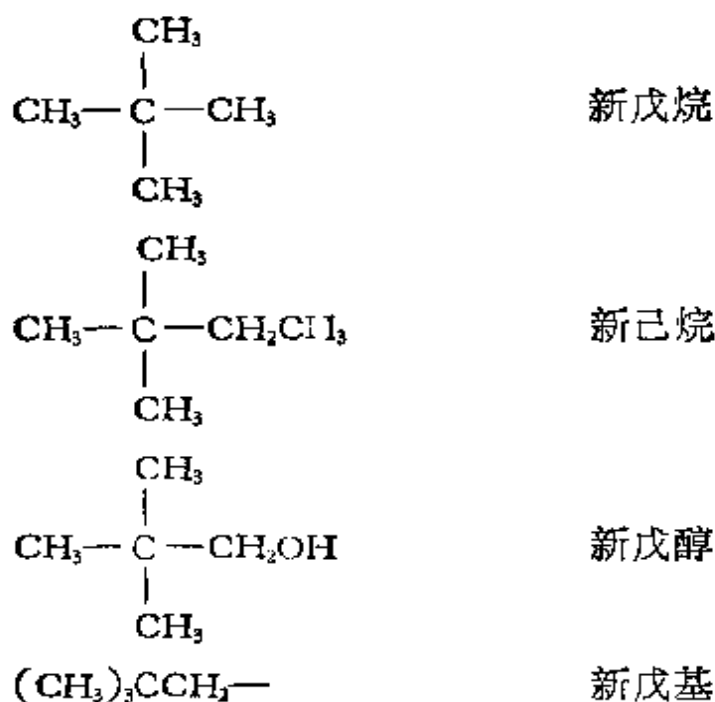
例:

| | |
|---|--------|
| $\begin{array}{c} \text{CH}_3\text{CHCH}_2\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$ | 异戊烷 |
| $\begin{array}{c} \text{CH}_3\text{CH}-\text{OH} \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$ | 异丙醇 |
| $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \quad \text{O} \quad \text{CH}_3 \\ \diagdown \quad \quad / \\ \text{CHC}-\text{OCH}_2\text{CH} \\ \diagup \quad \quad \diagdown \\ \text{CH}_3 \quad \quad \text{CH}_3 \end{array}$ | 异丁酸异丁酯 |
| $(\text{CH}_3)_2\text{CHCHO}$ | 异丁醛 |
| $\begin{array}{c} \text{CH}_2 \\ \diagdown \\ \text{C}-\text{CH}=\text{CH}_2 \\ \diagup \\ \text{CH}_3 \end{array}$ | 异戊二烯 |
| $\begin{array}{c} \text{CH}_2 \\ \diagdown \\ \text{C}- \\ \diagup \\ \text{CH}_3 \end{array}$ | 异丙烯基 |

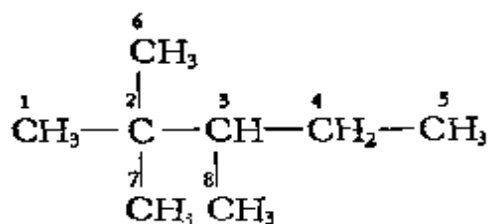
其中异戊二烯及异丙烯基为例外,只限于未被取代的情况下使用。

[新]: 专指具有叔丁基结构的五、六碳原子的链烃化合物。

例:

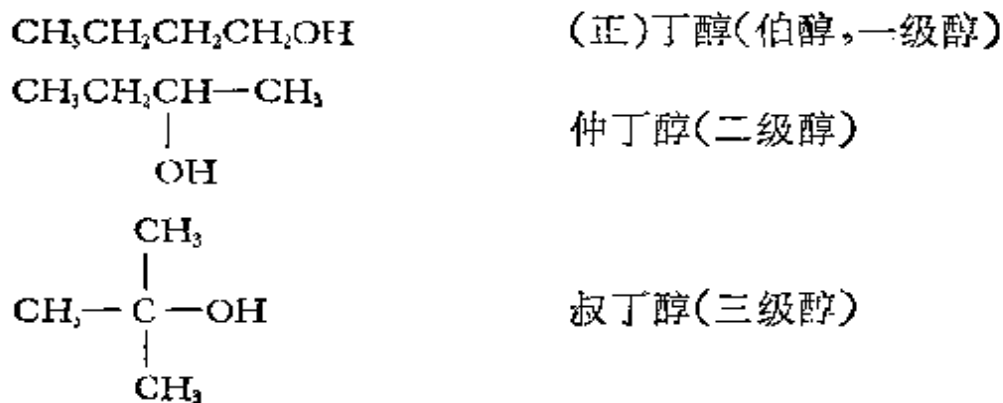


〔伯〕、〔仲〕、〔叔〕、〔季〕以及与其相对应的一级、二级、三级和四级是表示链异构或碳原子不同取代程度的形容词。



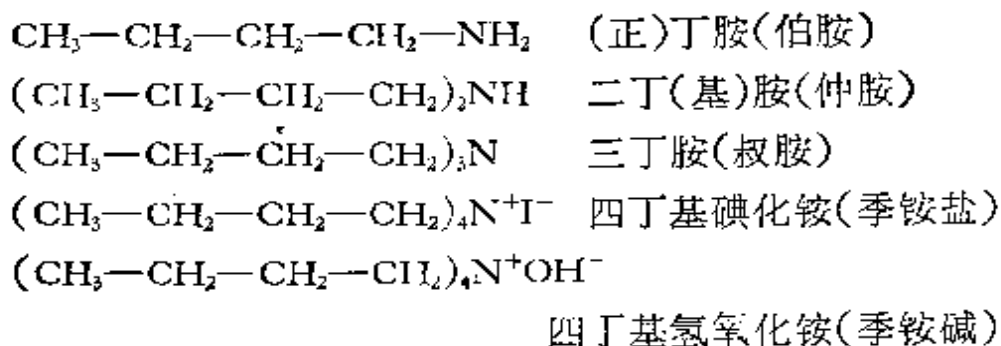
其中 C_1 、 C_5 、 C_6 、 C_7 、 C_8 为伯碳原子（或一级碳原子）； C_4 为仲碳原子（或二级碳原子）； C_3 为叔碳原子（或三级碳原子）； C_2 为季碳原子（或四级碳原子）。由不同级别碳原子所衍生的醇、胺和卤化物等，它们的级别与原碳原子相同。

例：



[伯]、[仲]、[叔]、[季]用来形容氮原子的不同程度的取代。一般均用在各胺类化合物的总称上。

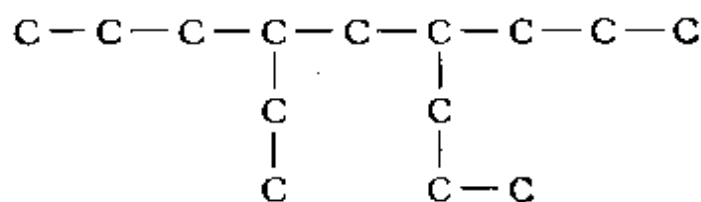
例:



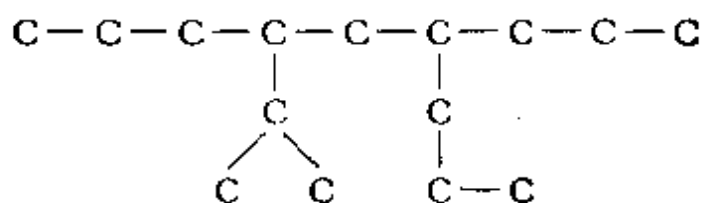
2.25 支链和取代基列出顺序

当分子结构中有几条支链或同时存在两个以上的取代基时,则在名称中支链或取代基按立体化学中次序规则(见 6.1 节)顺序列出,指定“较优”基团后列出。

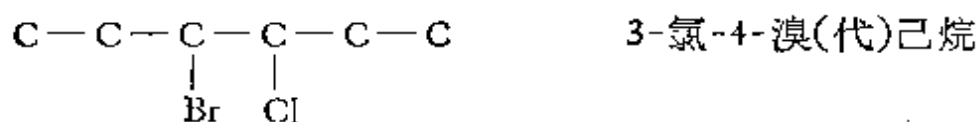
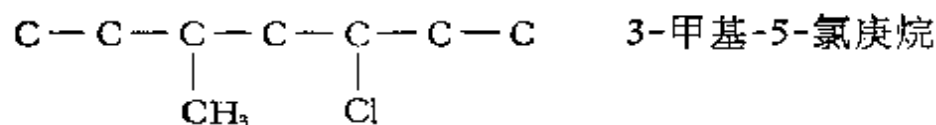
例:



4-乙基-6-丙基壬烷



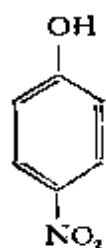
4-丙基-6-异丙基壬烷



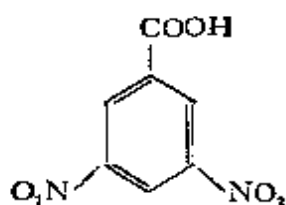
多元取代芳香族化合物按习惯,选择母体(使其编号最小)来命名,环上取代基的列出次序其原则与链烃相同,即也遵循编号数

字小和“次序规则”等。

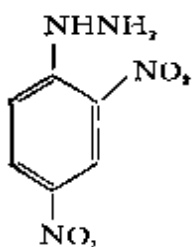
例:



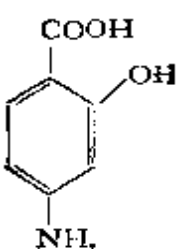
对硝基苯酚



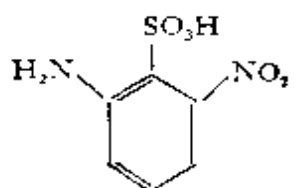
3, 5-二硝基苯甲酸



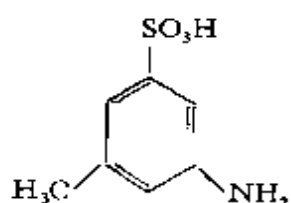
2, 4-二硝基苯肼



对氨基水杨酸



2-氨基-6-硝基苯磺酸

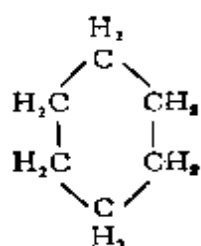


3-甲基-5-氨基苯磺酸

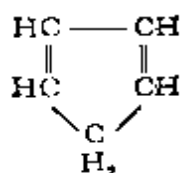
2.3 脂 环 烃

简单的脂环烃母核名称一般在其相应的链烃名称的前面加上词头“环”字构成。

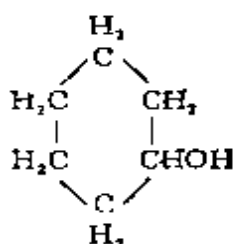
例:



环己烷



环戊二烯



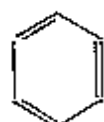
环己醇

2.4 芳香烃

2.4.1 芳香烃的特定名称

重要的芳香烃母核以音译西文名, 给予特定名称。

常见单环芳香烃母核环己三烯的特定名称为苯。

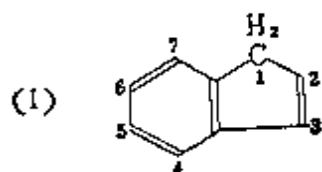


或

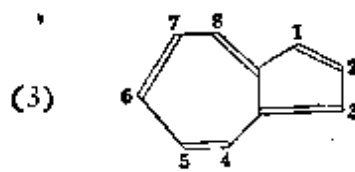


苯 (benzene)

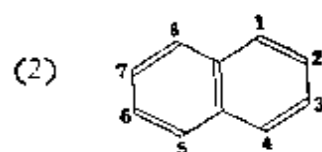
常见的多环芳香烃母核的特定名称有:



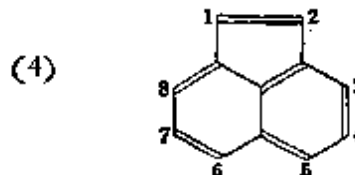
茚
(indene)



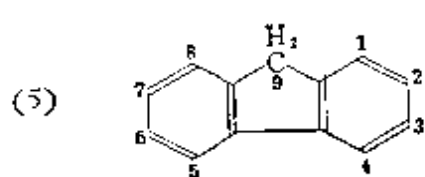
薹
(azulene)



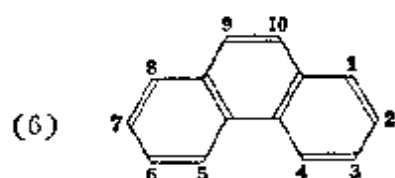
萘
(naphthalene)



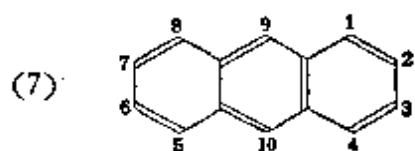
苈
(acenaphthylene)



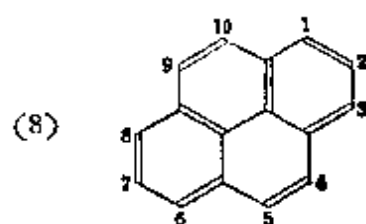
芴
(fluorene)



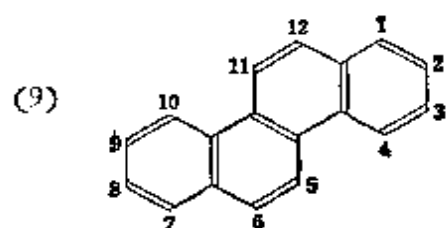
菲
(phenanthrene)



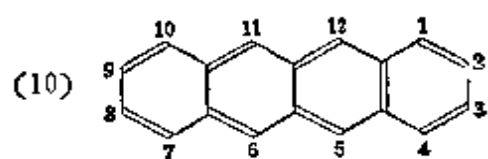
蒽 (anthracene)



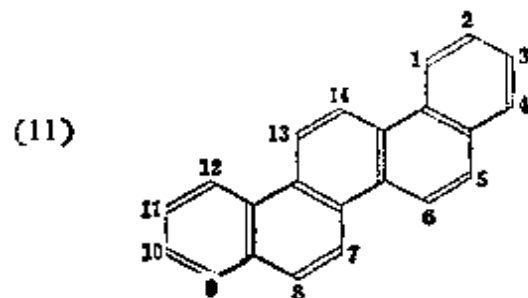
䟽
(pyrene)



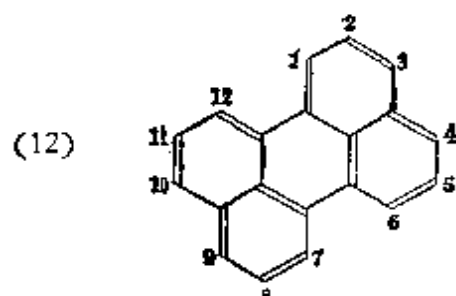
䟽 (chrysene)



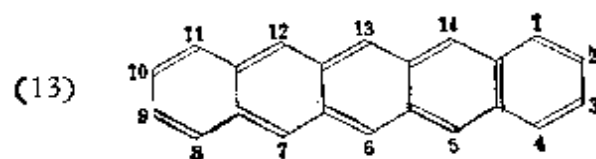
并四苯 (naphthacene)



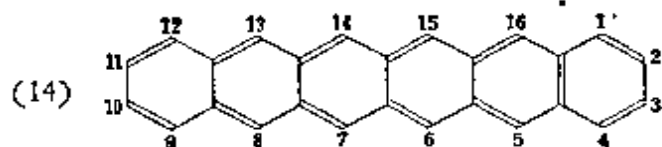
苈 (picene)



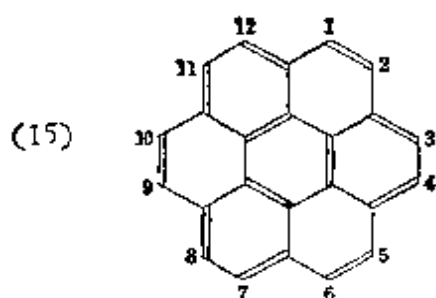
芘
(perylene)



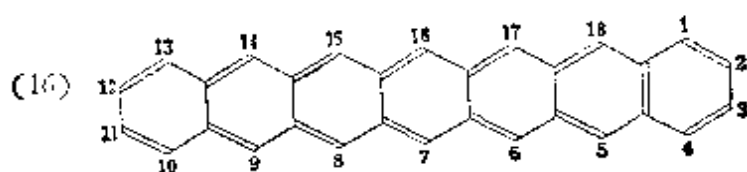
并五苯
(pentacene)



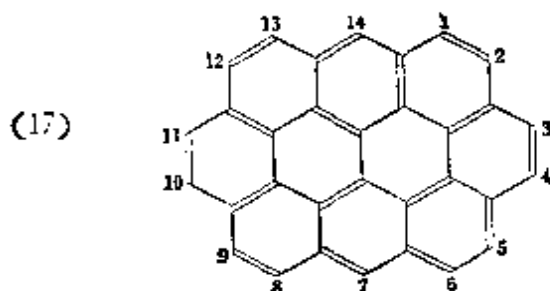
并六苯 (hexacene)



䟽 (coronene)



并七苯 (heptacene)



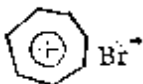
卵苯 (ovalene)

此外,环戊二烯负离子和环庚三烯正离子可俗称为茂和莖。



Fe

二茂铁



溴化莖

2.42 稠环烃

(一)直线式稠环,几个苯环通过两位或多位互相结合成一横排线状的苯稠环,除萘、蒽用特定名称外,一般命名为并几苯(见 1.2 节介词“并”)。

(二)非直线式稠环:即为几个苯环通过两位或多位互相结合,成为角式的苯稠环,除了已有的特定名称者外(见 2.41 节),均用含有最多环数的、有特定名称的环或直线式稠环作为母体环,其余部分称为取代部分,作为取代部分应尽可能简单。

(1) 稠边位置的表示方法:母体部分和取代部分确定以后,各环的稠合位置(即公用边)需表示清楚,方法是:

① 母体各边按原环系编号的顺序,将各边标以 a 、 b 、 c ……。

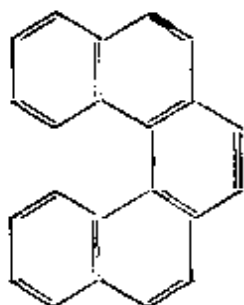
② 取代部分根据原环系正常编号顺序，将各原子标以 1, 2, 3……。若取代部分是纯碳环，应使稠边编号最小。

③ 命名时，将取代部分的数字列在前，母体部分字母列于后，数字和字母之间用“-”半字线相连，并用[]括上，置于取代名称和母体名称之间。

④ 稠合处的数字顺序，按母体定位字母顺序为准，方向相同时数字从小到大；相反时，则数字从大到小。

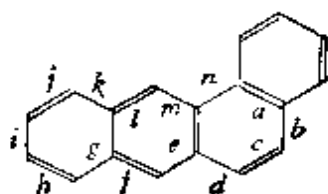
⑤ 稠合以后环系另行编号。

例：

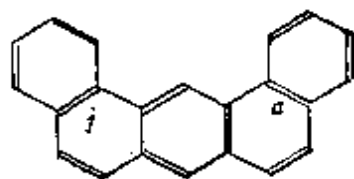


二苯并菲

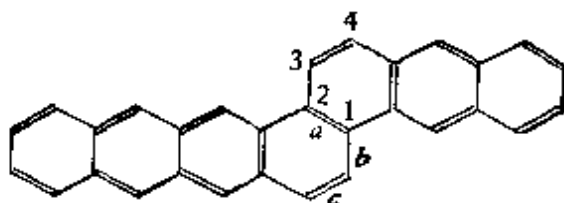
(不叫蔡并菲，因为虽然蔡并环只有一个，而苯并环有两个，但苯并比蔡并简单)



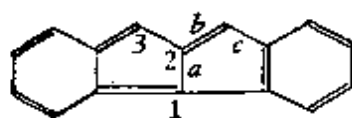
苯并[a]蒽



二苯并[a, h]蒽



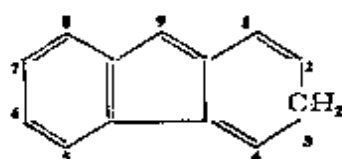
蒽并[2, 1-a]并四苯



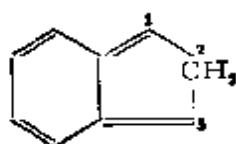
萘并[1, 2-a]蒽

(2) 额外氢的标明方法: 当两个或两个以上具有最大数目非累积双键的异构稠合母环可使用同一名称, 而此名称又可以用标出一个或数个氢原子(即额外氢)在式中所占位置的方法予以肯定时, 则可以在名称中注上一个位码, 位码后附上斜体大写 *H* 来标明额外氢, 从而命名各异构体。

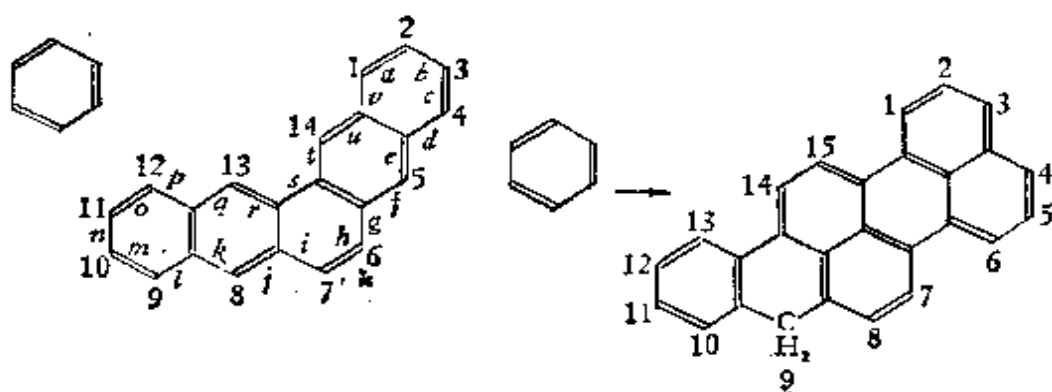
例:



3*H*-芴



2*H*-萘

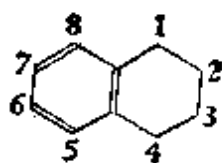


9*H*-二苯并[*de, rst*]戊芬

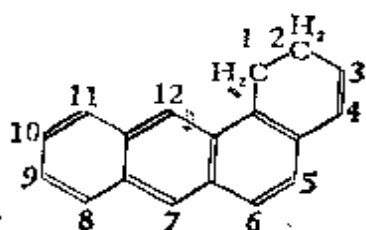
(三) 稠环烃加氢化合物的命名:

(1) 部分不是芳香烃的稠环烃, 可以看作是芳香环烃的加氢物来命名, 并在名称前面标出氢化的位次, 必要时标记出几氢化, 即若干氢化某芳烃。

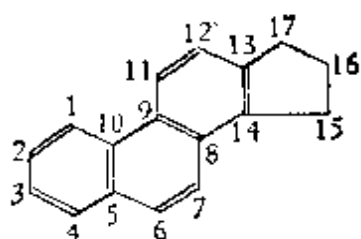
例:



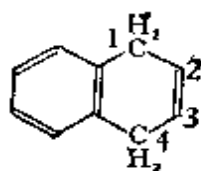
1, 2, 3, 4-四氢(化)萘



1, 2-二氢(化)苯并[*a*]蒽

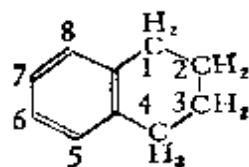


16, 17-二氢(化)-15-*H*-环戊二烯并[*a*]菲

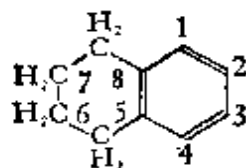


1, 4-二氢化萘

当有选择余地时,则将加氢碳原子给以尽可能低的编号。

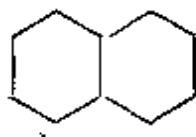


正确



不正确

(2) 完全饱和的稠环烃,命名方法与部分饱和稠环烃相同。即当芳香母核已有特定名称,就可以在芳香母核名称前若干“氢化”而完成命名。

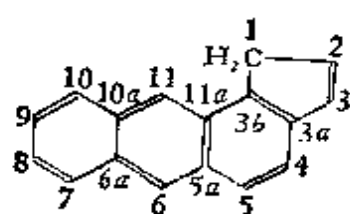


十氢化萘

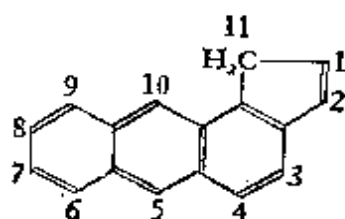
(四)稠环烃的编号:

(1) 结构不对称的单环烃和有特定名称的稠环烃均采用固定编号法(见 2.41 节),它们衍生的杂环,也沿用固定的编号法。

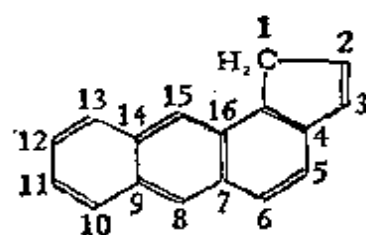
编号一般自右上方第一个环最上方的自由角开始,按顺时针方向进行。在可能情况下,需尽量给予杂原子和额外氢以最小的编号;此外,稠边原子不编入内。



正确

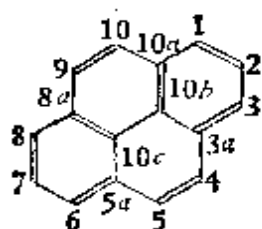


不正确

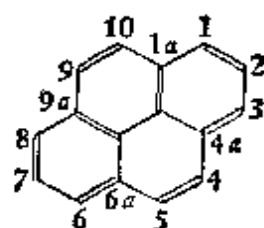


不正确

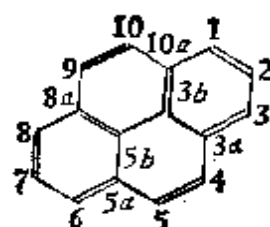
(2) 稠环上碳原子的编号：对于稠环上的非共用碳原子的编号，按顺时针顺序选择紧随前一碳原子的位次；而稠边上共用碳原子的编号，则按顺时针的顺序，取紧挨着前面的最高位次为它的位次，并分别用 *a*、*b* 标示。



正确



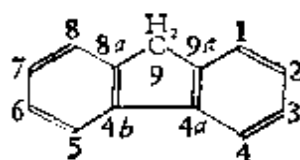
不正确



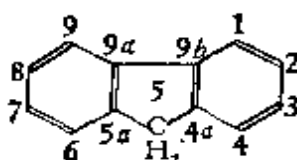
不正确

稠边碳原子的编号，也同样要遵循最低系列编号的原则。

例：

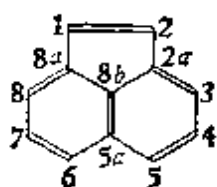


正确

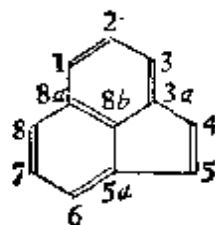


不正确

编号
4, 4, 8, 9 小于 4, 5, 9, 9



正确



不正确

编号
2, 5, 8, 8 小于 3, 5, 8, 8

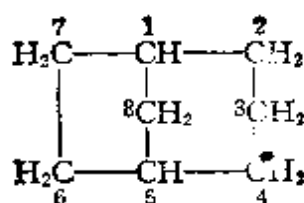
2.5 桥 烃

2.5.1 简单的桥环

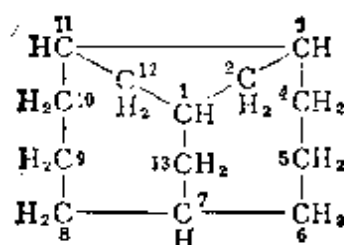
简单的桥环可用二环、三环等做词头，然后在方括号中注上各

桥所含碳原子数,放在相当于环中全体碳原子数的链烃名称之前。方括号中碳原子数按由多到少的次序列出。方括号内数字用下角圆点隔开表示原子数目。

例:



二环 [3.2.1] 辛烷



三环 [5.5.1.0^{3,11}] 十三烷

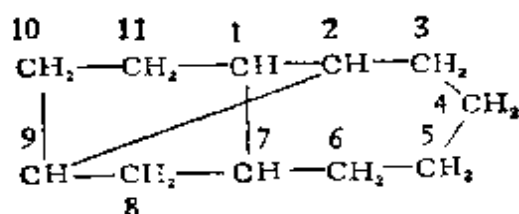
后一化合物命名中, 0 的指数 3, 11 用逗点隔开, 表示为无原子的键桥 (叫做键桥, 以区别于原子桥) 在整个环编号中桥接的位次。

比较简单的桥环, 也可以用“亚某基环某烷”的方法予以命名。如上例中“二环 [3.2.1] 辛烷”也可命名为 1, 5-亚甲基环庚烷。

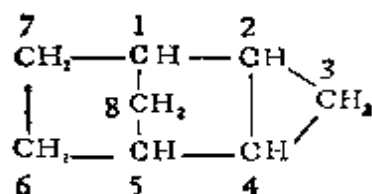
2.52 桥环的编号

桥环的编号原则: 自桥的一端开始, 循最长的环节编到桥的另一端, 然后再循余下的最长的环节编回到起始桥端。以此类推。

例:



三环 [5.4.0.0^{2,9}] 十一烷



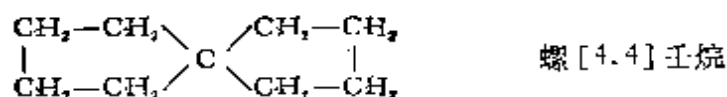
三环 [3.2.1.0^{2,4}] 辛烷

2.6 螺 烃

2.61 简单的螺环

螺环的命名法, 是根据整个环中所含的螺原子数目而用螺、二

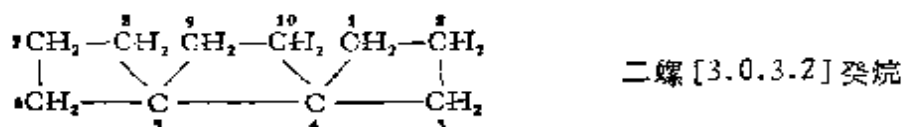
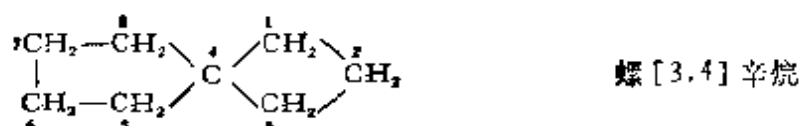
螺、三螺等词头,然后在方括号中顺着整个环的编号次序用数字标明各螺原子间所夹的碳原子数目,加在相当于整个环的链烃名前,数字之间用下角圆点隔开。



螺环烃的编号方法:

单螺环从邻接于螺原子的一个碳原子开始,由小环编到大环。
多螺环从邻接于端螺原子的一个碳原子开始,由较小的端环顺次编完,并尽量给螺原子以最小的编号。

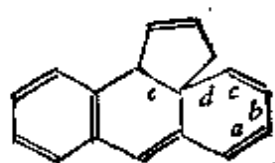
例:



2.62 与稠环有关的简单螺环

含有螺原子的普通稠环,一般均按稠环命名法命名。

例:

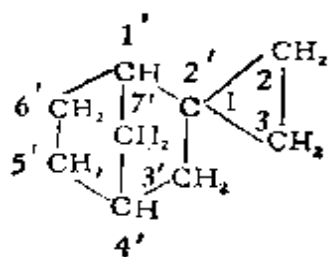


环戊烯并[4,3-*c*]-10,10*a*-二氢蒽

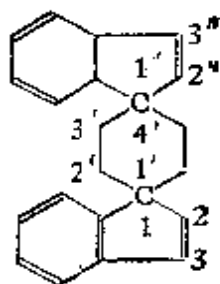
2.63 复杂的螺环

用螺、二螺等做词头,并将各组分环名用方括号括上置于后,在组分环名称之间用各自原有的编位号数标出螺合的位次。第一个组分环编号不加撇,第二个组分环编号加一撇,若有第三个组分环,则其编号加二撇,其它以此类推。

例:



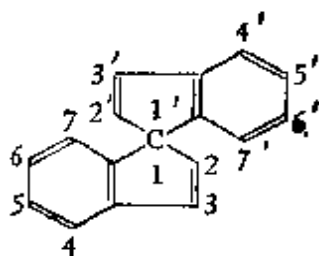
螺[环丙烷-1,2'-降茛烷]
或 螺[环丙烷-1,2'-(1',4'-二甲基
环己烷)]



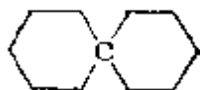
二螺[茛-1,1'-环己烷-4',1''-茛]
或 茛-1-螺-1'-环己烷-4'-螺-1''-
茛

两个相同的环所组成的单螺环用词头螺双(spirobi)命名。各组分环维持其原编号,但一个加撇,一个不加撇。

例:



1,1'-螺双茛



螺双环己烷

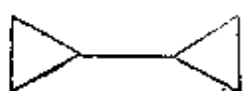
2.7 联环烃

两个或两个以上的环(单环或稠环),彼此以双键或单键直接相连,而且联键的总数少于所含环系的总数,称为联环烃。

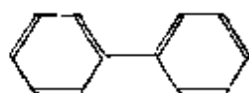
(一)两个相同环烃组成的联环烃,使用介词联字,以“联二”、“联三”作为词头,即为“联二某烃(基)”、“联三某烃(基)”等。

联环烃中诸环系,分别保留各烃(基)的原编号。一个用带撇的数字,则另一个用不带撇的。联接点用相应的位次标在名称前。如果编号可以选择,则给联接点编号以较低的环系、不带撇的数字。

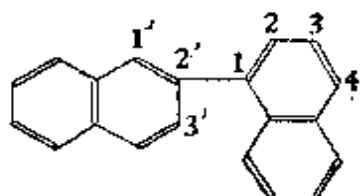
例:



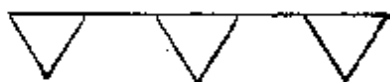
1,1'-联环丙烷



联苯



1,2'-联二萘



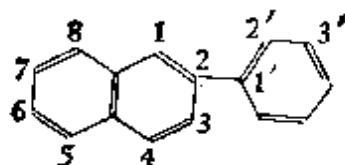
联三环丙烷

(二)两个不相同的环系联合,则应择定一个环作为基本组分(或称母核),而将其它的环系作为取代基来命名。基本组分以不带撇的数字编号,而取代基则用带撇的数字编号。

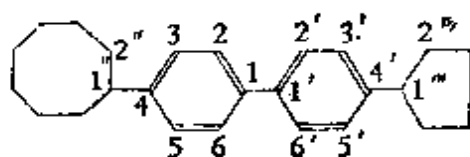
基本组分依次按下列特征选择:

(1) 所含环数较多者。

例:



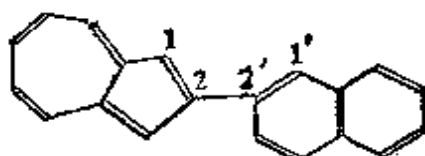
2-苯基蒽



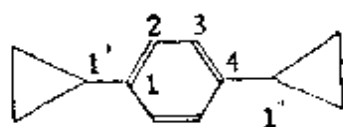
4-环辛基-4'-环戊基联苯

(2) 所含环系较大者。

例:

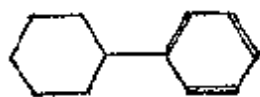


2-(2'-萘基)蒽



1,4-二环丙基苯

(3) 氢化程度最低者。

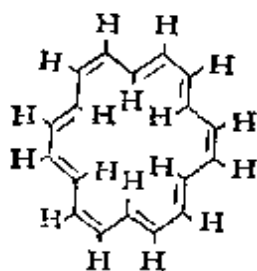


环己基苯

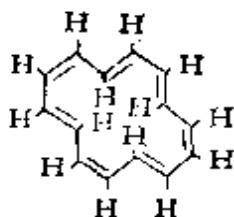
2.8 轮 烯

轮烯 (annulene) 是环状共轭的多烯烃，命名时以轮烯作为母体名，把环内碳原子总数用带方括号的阿拉伯数字标注在母体名称前。

例：



[18]轮烯



[14]轮烯

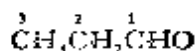
3. 官能团和取代基的位次标明法和位次符号的省略法

3.1 官能团和取代基位次的选定

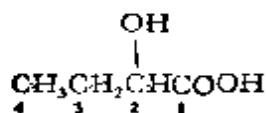
官能团和取代基在化合物中的位次指的就是母体化合物和它连接的碳原子(或杂原子)的位次。

在编号时应使官能团或取代基的位次最小。

例：



1-丙醛(1-在命名中通常省略)不能叫 3-丙醛



2-羟基丁酸(或 α -羟基丁酸)

$\text{CH}_2=\text{CHCN}$ 丙烯腈(不必叫2-丙烯腈)

$\begin{array}{c} \text{O} \quad \quad \text{O} \\ \parallel \quad \parallel \\ \text{CH}_3\text{C}-\text{CH}-\text{C}-\text{CH}_3 \\ | \\ \text{CH}_2\text{CH}=\text{CH}_2 \end{array}$
 3-烯丙基-2,4-戊二酮

$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{CH}_2=\text{CHCH}_2\text{C}-\text{CH}_3 \end{array}$
 4-戊烯-2-酮

$\begin{array}{c} \text{O} \quad \quad \text{O} \\ \parallel \quad \parallel \\ \text{CH}_2=\text{C}-\text{C}-\text{CH}_2\text{C}-\text{CH}_3 \\ | \\ \text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3 \end{array}$
 5-丙基-5-己烯-2,4-二酮

双键、叁键的位次指的是键开始碳原子的位次。在编号时,应注意使双键或叁键具有最小的数目。在双、叁键同时存在的简单化合物中,当它们的位次相同时,应使双键具有最小的位次。

例:

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}=\text{CHCH}_3$ 2-己烯
 $\text{CH}_3\text{CH}=\text{CHC}\equiv\text{CH}$ 3-戊烯-1-炔
 $\text{CH}\equiv\text{C}-\text{CH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$ 1-戊烯-4-炔

3.2 用编号来标明位次

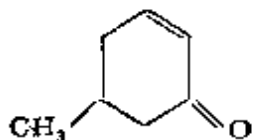
官能团和取代基的位次可以有許多种标明法。用编号来标明位次是最系统的一种方法。规定将编号1,2,3,4等写在官能团(或取代基)名的前面。为了便于分辨,可将标明位次的1,2,3等读成一位,二位,三位等等。数字和名称连接处,在书写时要加上半字线。

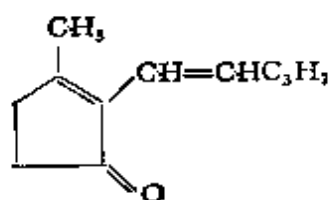
例:

$\text{H}_2\text{NCH}_2\text{CH}=\text{CHCOOH}$ 4-氨基-2-丁烯酸
 $\begin{array}{c} \text{Cl}_2\text{CHCHCH}_2\text{NH}_2 \\ | \\ \text{OH} \end{array}$ 2-羟基-3,3-二氯丙胺

在用数字编号时,还常常采用以希腊字母 Δ 来标明烯键的位次,即在 Δ 右上角标上数字。

例:


 5-甲基- Δ^2 -环己烯-1-酮



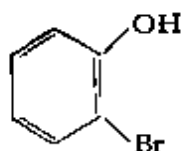
3-甲基- $\Delta^{2,1'}$ -戊烯基环戊烯酮

3.3 用希腊字母来标明位次

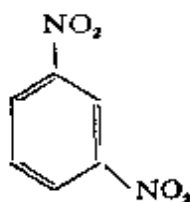
希腊字母也用来标明位次 (见 1.41 节)。要注意的是用于羧酸及其衍生物和杂环时, α -位相当第 2 位, β -位相当于第 3 位, ω 则常常指端位。

在多元取代苯等化合物中, 取代基的相对位置常用拉丁字头 o -(ortho)、 m -(meta) 和 p -(para) 分别表示邻、间、对的位次。

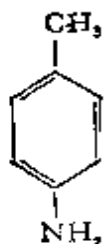
例:



邻(或 o -)溴苯酚



间(或 m -)二硝基苯

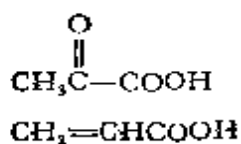


对(或 p -)甲苯胺

3.4 位次符号的省略法则

(一)当化合物只有一种可能的结构时,可省去位次符号。

例:

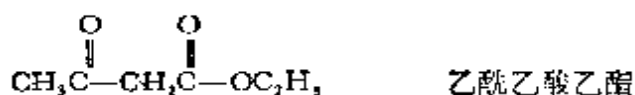


丙酮酸

丙烯酸



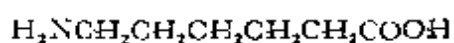
丙二酸二乙酯



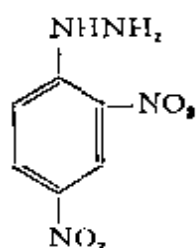
乙酰乙酸乙酯

(二) 1-位的省略: 1-位取代基或官能团, 作为名称词尾时, 在不致误解时, 则可以将位次编号省略。

例:



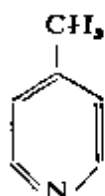
6-氨基己酸不必叫 6-氨基-1-己酸



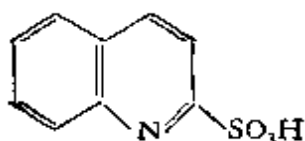
2, 4-二硝基苯肼
不必叫 2, 4-二硝基-1-苯肼

(三) 杂环衍生物中 1-和 2-位的省略: 当 1-位为杂原子时, 其 1-位位次常常可以省略; 此外, 2-位官能团若用作名称的最后一个词尾, 便可省去。

例:



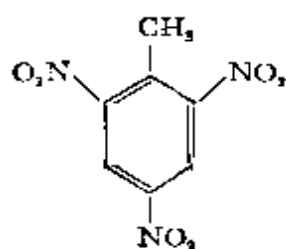
4-甲基吡啶(或 γ -甲基吡啶)



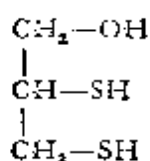
喹啉磺酸(或 2-喹啉磺酸)

(四) 最常见的异构体省略其位次符号: 几种异构体中, 最常见的一种, 通常将位次符号省略。

例:



三硝基甲苯



二巯基丙醇(或 2, 3-二巯基丙醇)

4. 官能团和取代基

4.1 官能团和取代基的命名

(一) 有机化合物分子内常见的官能团或取代基及其名称如下:

| 官能团或取代基 | 名称 |
|---|---------|
| $ \begin{array}{c} \text{R} \diagdown \\ \text{C}=\text{C} \\ \text{R} \diagup \end{array} $ | 烯 |
| $ \text{R} - \text{C} \equiv \text{C} - \text{R} $ | 炔 |
| $ \text{R} - \text{OH} (\text{Ph} - \text{OH}) $ | 醇或酚 |
| $ \text{R} - \text{NH}_2 $ | 胺 |
| $ \text{R} - \text{CHO} $ | 醛 |
| $ \text{R}_2\text{C}=\text{O} $ | 酮 |
| $ \text{R} - \text{SH} (\text{Ph} - \text{SH}) $ | 硫醇或硫酚 |
| $ \text{R} - \text{COOH} $ | 羧酸 |
| $ \begin{array}{c} \text{O} \\ // \\ \text{R} - \text{C} \\ \diagdown \\ \text{X} \end{array} $ | 酰卤 |
| $ \begin{array}{c} \text{O} \\ // \\ \text{R} - \text{C} \\ \diagdown \\ \text{OR}' \end{array} \quad \begin{array}{c} (\text{R} - \text{CH}(\text{CH}_2)_n - \text{C}=\text{O}) \\ \quad \quad \quad \\ \text{O} \end{array} $ | 酯(内酯) |
| $ \begin{array}{c} \text{O} \\ // \\ \text{R} - \text{C} \\ \diagdown \\ \text{NH}_2 \end{array} \quad \begin{array}{c} (\text{R} - \text{CH}(\text{CH}_2)_n - \text{C}=\text{O}) \\ \quad \quad \quad \\ \text{NH} \end{array} $ | 酰胺(内酰胺) |
| $ \begin{array}{c} \text{O} \\ // \\ \text{R} - \text{C} \\ \diagdown \\ \text{O} \\ \\ \text{R} - \text{C} \\ // \\ \text{O} \end{array} $ | 酸酐 |

| | |
|--|-------|
| $R-O-R'$ | 醚 |
| $R-S-R'$ | 硫醚 |
| $\begin{array}{c} O \\ \uparrow \\ R-S-R \end{array}$ | 亚砷 |
| $\begin{array}{c} O \\ \uparrow \\ R-S-R \\ \downarrow \\ O \end{array}$ | 砷 |
| $R-SO_3H$ | 烷基磺酸 |
| $R-SO_2-OR'$ | 烷基磺酸酯 |
| $R-SO_2-NHR'$ | 烷基磺酰胺 |
| $\begin{array}{c} O \\ \\ R-C-O-O-H \end{array}$ | 过氧酸 |
| $R-CN$ | 腈 |
| $\begin{array}{c} O \\ \\ RC-OM \end{array}$ (M 为阳离子) | 羧酸盐 |
| $R-X$ | 卤化物 |
| $-NO_2$ | 硝基 |
| $-NO$ | 亚硝基 |
| $-N \equiv N^+X^-$ | 重氮盐 |

(二) 有机化合物分子中所含官能团和取代基,在化合物名称中都以词头和词尾两种形式出现。同一官能团或取代基,其词头、词尾的形式往往不同。列表如下:

| 官能团或取代基 | 词 头 名 称 | 词 尾 名 称 |
|---------|---------|---------|
| $-OH$ | 羟基 | 醇、酚 |
| $-SH$ | 巯基 | 硫醇 |

续表

| 官能团或取代基 | 词 头 名 称 | 词 尾 名 称 |
|---|----------------------------|---------|
| $-\text{NHR}$ | 氨基(或 $\text{R}=\text{H}$) | 胺 |
| $-\text{CN}$ | 氰基 | 腈 |
| $-\text{OR}$ | 烷氧基 | 醚 |
| $-\text{SR}$ | 烷硫基 | 硫醚 |
| $\begin{array}{c} \text{R}-\text{C}-\text{R}' \\ \\ \text{S} \end{array}$ | | 硫酮 |
| $\begin{array}{c} \text{R}-\text{C} \begin{array}{l} \nearrow \text{O} \\ \searrow \end{array} \end{array}$ | 酰基 | 酮 |
| $\begin{array}{c} \text{H}-\text{C} \begin{array}{l} \nearrow \text{O} \\ \searrow \end{array} \end{array}$ | 甲酰基 | 醛 |

4.2 复基的命名

在有误会时,复基名称后面要加上基字,不要略去,复基的个数用二、三、四等来表示。必要时可以把复基的名称放在()内。读时复基数目,可读成两个、三个等。

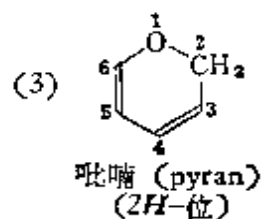
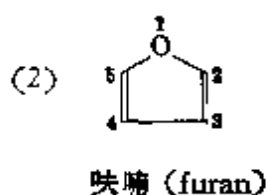
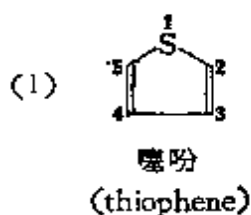
$(\text{CH}_3)_2\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{N}(\text{CH}_3)_2$ 1,2-二(二甲(基)氨基)乙烷

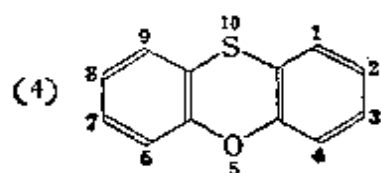
读作: 一、二位两个二甲氨基乙烷

5. 杂 环 化 合 物

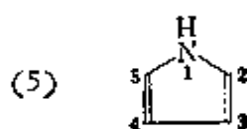
5.1 基本杂环母核的特定名称

原则上是2—3个汉字的音译,这与环烃中已通用的“苯”、“萘”、“蒽”、“菲”……的名称具有类似的普遍性,名词的结构尊重我国习惯,以“口”旁作为杂环的标志。

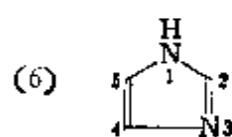




吩噻嗪
(phenoxathiin)



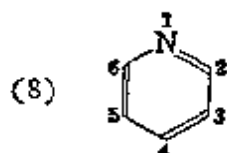
吡咯
(pyrrole)



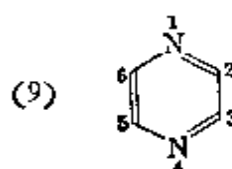
咪唑
(imidazole)



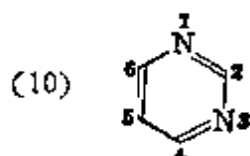
吡唑
(pyrazole)



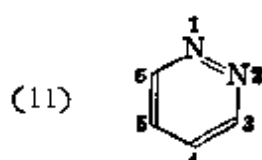
吡啶
(pyridine)



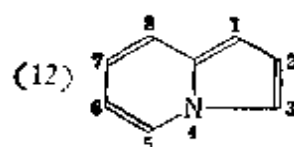
吡嗪
(pyrazine)



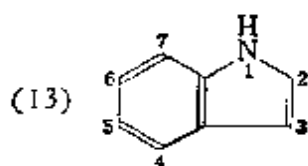
嘧啶
(pyrimidine)



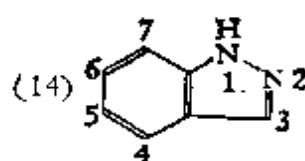
哒嗪
(pyridazine)



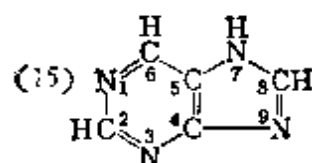
吲哚
(indolizine)



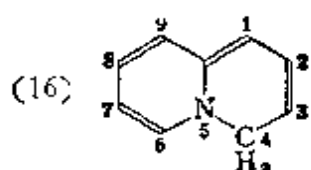
吲哚
(indole)



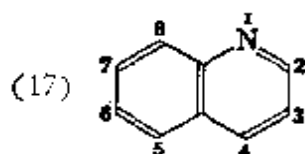
1H-吡唑
(1H-indazole)



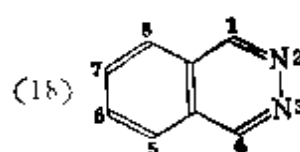
嘌呤 (purine)



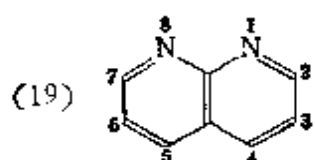
4H-喹啉
(4H-quinolizine)



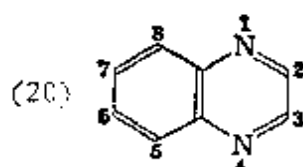
喹啉
(quinoline)



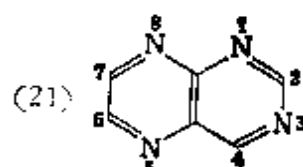
酞嗪
(phthalazine)



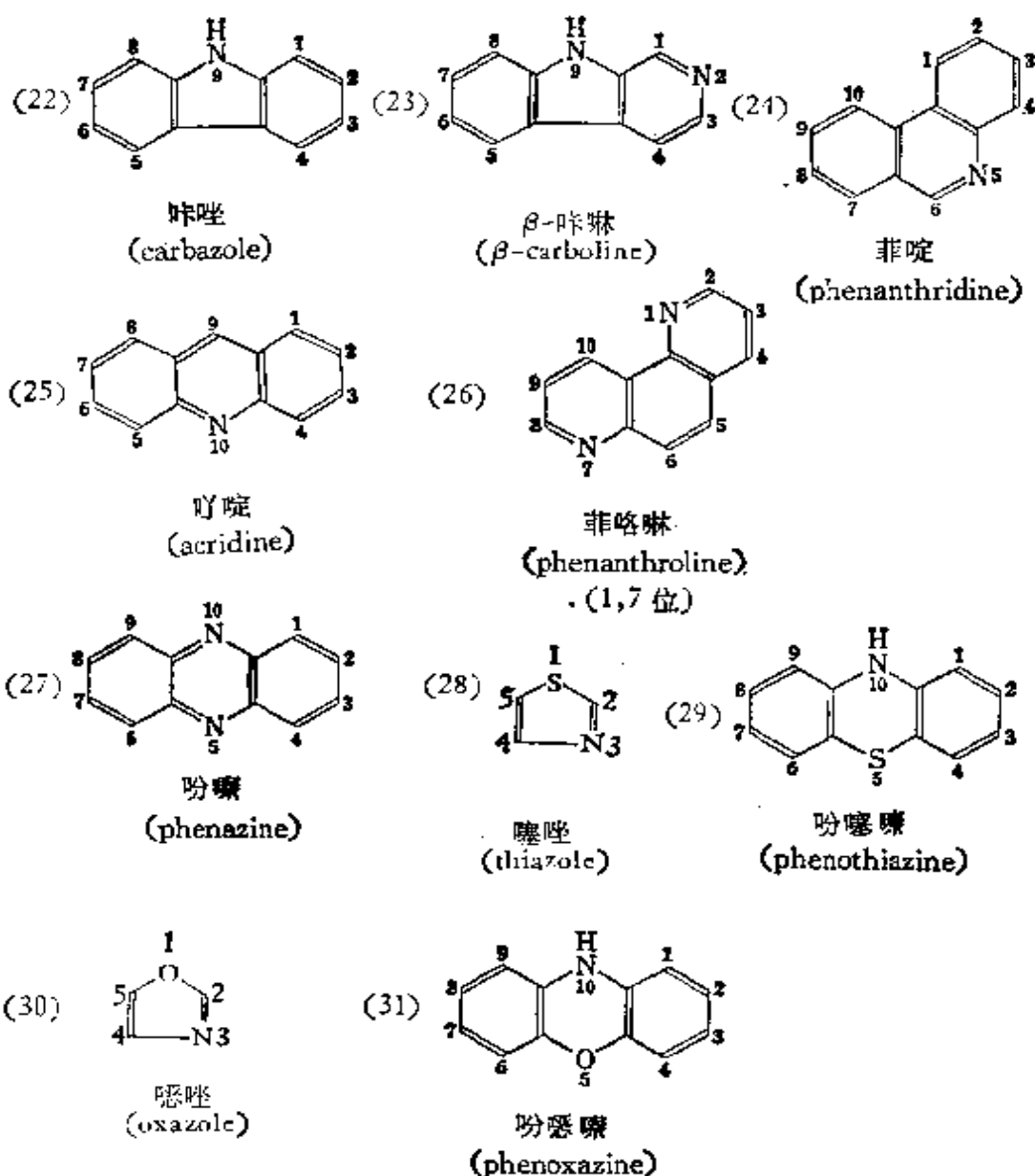
萘啶
(naphthyridine)
(1,8-位)



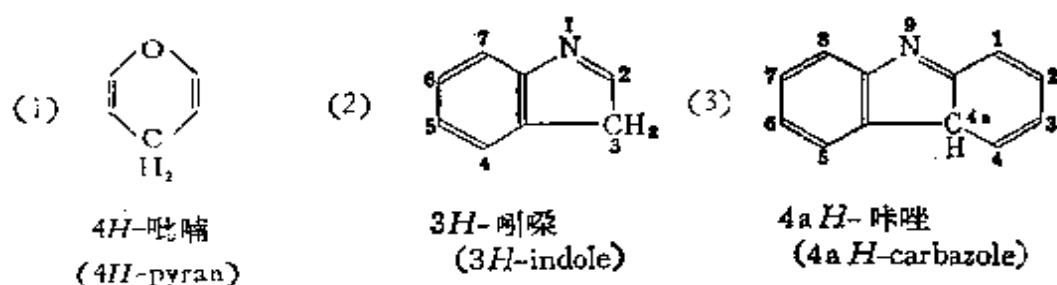
喹啉
(quinoxaline)



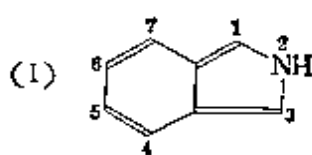
蝶啶
(pteridine)



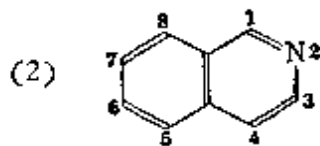
以上杂环氢的位置不相同者,把 *H* (用大写斜体) 及其位置编号放在词首,在并环上者,注明边号(用 a、b、c...表示)。



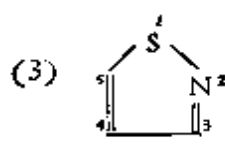
当杂原子在环上的位置不同时,可视为异构体。



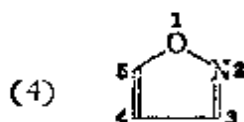
异吲哚
(isoindole)



异喹啉
(isoquinoline)



异噻唑
(isothiazole)

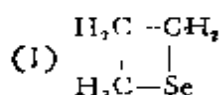


异噁唑
(isoxazole)

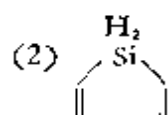
5.2 无特定名称的杂环

对于没有特定名称的杂环和复杂的杂环,采用“杂”字作介词,可以看作是碳环母核中碳原子被杂原子置换后的衍生物来命名。命名方法是把其相当的碳环作为母体名,在名前加上某杂(或某某杂),并注明位次。

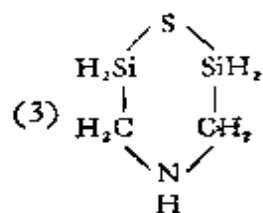
(一)用于单杂环时,杂原子取较低的位次,多个杂原子同时存在时,按 O、S、Se、Te、N、P、As、Sb、Si、Sn、Pb、Hg 的先后顺序。只有一个杂原子的杂环,名称前可不注位次。



硒杂环丁烷

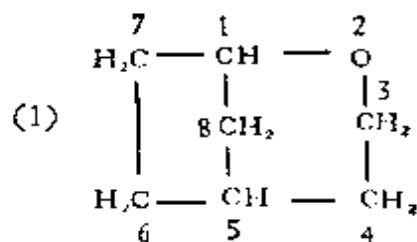


硅杂-2,4-环戊二烯

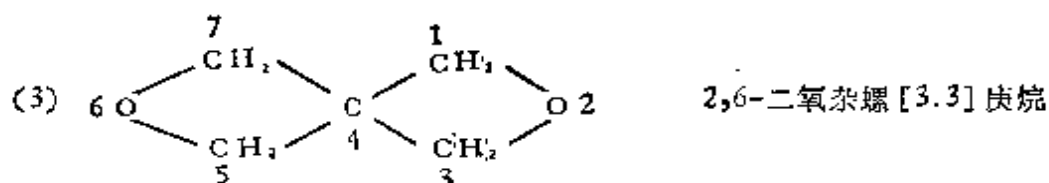
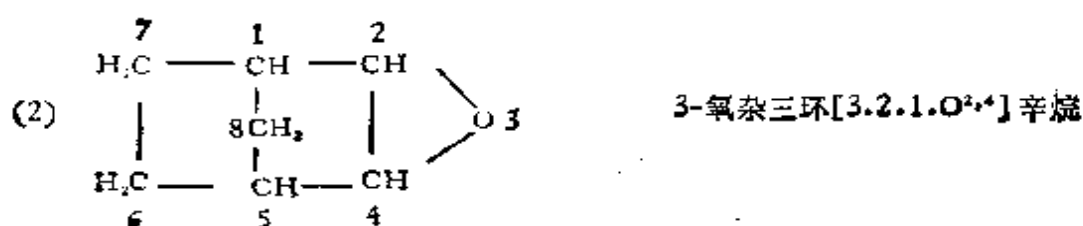


1-硫-4-氮-2,6-二硅杂环己烷

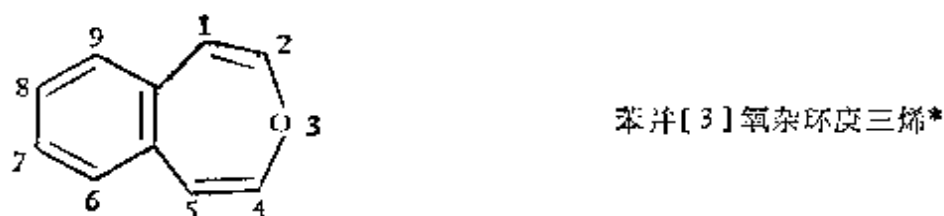
(二)用于杂桥环和杂螺环时,母体名称前方括号内数目,按通则仅表示桥上的原子数目,中间用下角“·”圆点分开。



2-氧杂二环[3.2.1]辛烷



(三) 并联的二个环中如有一个苯环，则把“苯”字放在最前，杂环名称放在后面，中间用介词“并”字。其编号可根据习惯，不一定从杂原子开始。



5.3 无特定名称的稠合杂环

一些稠合杂环无特定名称者，可以选择所含有特定名称的杂环作为母体基本环，并按其衍生物命名。名称中[]内编号对被并的母环用 a、b… 边号，对并环则用其自身的阿拉伯数目号码，或不用编号，如苯。

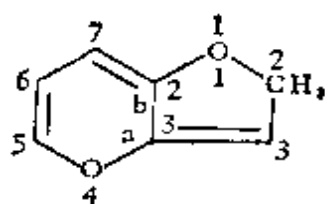
确定基本环的原则如下：

(一) 苯环与杂环并合时，含环数最多，有特定名称的杂环为基本环。



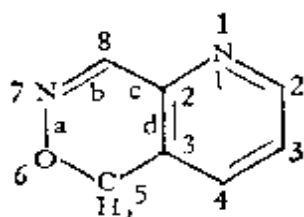
* 名称中[3]在这里仅指整环中氧的位置而不是指并联的位置。

(二) 所含的环比较大的组分。



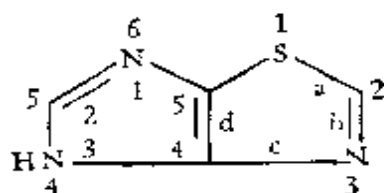
不叫 2H-吡喃并[3,2-*b*]咪唑，
而叫作 2H-吡喃并[3,2-*b*]吡嗪*
(*括号内 3, 2 是指顺咪唑环边号方向，
a, b... 属于吡喃环上的编号)

(三) 含杂原子数最多的组分。



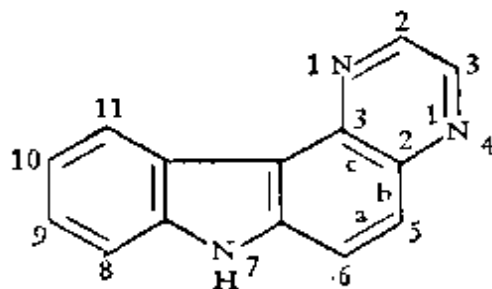
不叫邻噁嗪并[4,5-*b*]吡啶；而叫作
5H-吡啶并[2,3-*d*]邻噁嗪

(四) 含杂原子种数最多的组分。



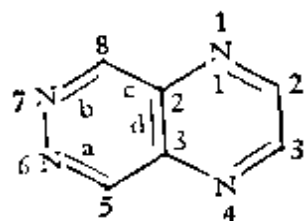
不叫 4H-噻唑并[4,5-*d*]咪唑，而叫
作 4H-咪唑并[4,5-*d*]噻唑

(五) 含环数目最多的组分。



不叫 7H-喹啉并[3,2-*f*]噻唑啉
而叫作 7H-吡嗪并[2,3-*c*]喹唑

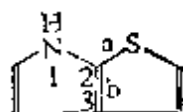
(六) 含相同数目的同种杂原子并有同样大小环时，则把稠合前杂原子编号较低者作为基本环。



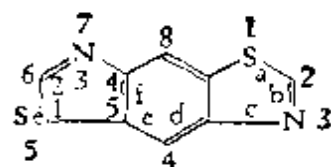
不叫吡嗪并[4,5-*b*]吡嗪而叫作吡嗪
并[2,3-*d*]吡嗪

(七) 当杂原子不止一种时，按 O、S、Se、Te、N、P、As、Sb、Si

…顺序,选先行列出的杂原子含量最多的组分。

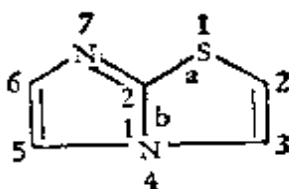


不叫噻吩并[2,3-*b*]吡咯而叫作吡咯并[2,3-*b*]噻吩



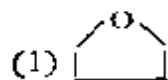
不叫噻唑并[5,4-*f*]苯并硒唑而叫作硒唑并[5,4-*f*]苯并噻唑

如果有一个杂原子占据了一个稠合位置,则稠合的两个组分环都应当视作含有该杂原子来命名。

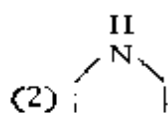


咪唑并[2,1-*b*]噻唑

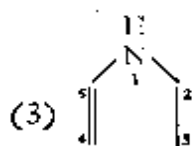
对含氢的杂环可用中文数字标明其数目,用阿拉伯数字标明其位置,全氢化物可只标明数目。其名称可按特定名称衍生物命名方法,或用音译,两种平行使用。其中含氮五元环也可在特定名后加“烷”字来命名。



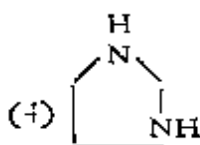
四氢呋喃



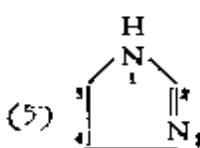
四氢吡咯或吡咯烷



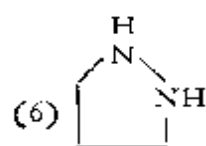
2,3-二氢吡咯或4-吡咯啉



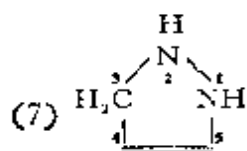
四氢咪唑或咪唑烷



4,5-二氢咪唑或2-咪唑啉



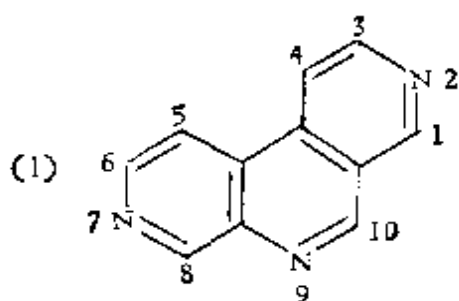
四氢吡啶或吡啶烷



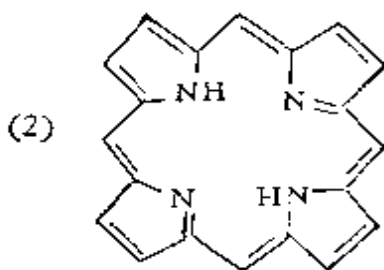
1,3-二氢吡啶或 3-吡啶啉

5.4 使用较少而已见诸文献的杂环

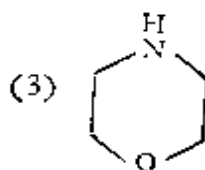
(一) 某些并联杂环,可以采用“杂”字命名或俗名。



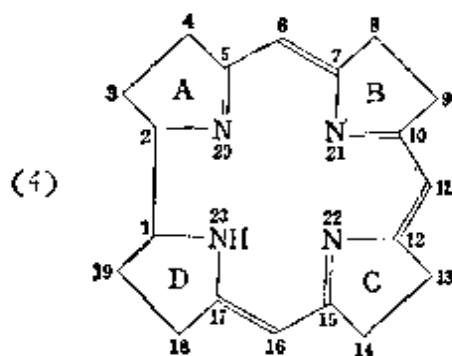
2,7,9-三氮杂菲



卟吩 (porphine)



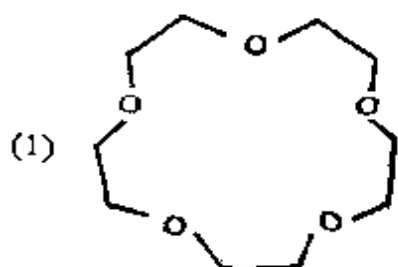
吗啉 (morpholine)



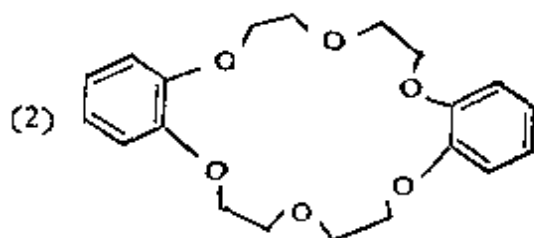
可啉 (corrin)

(二) 冠醚

冠醚是对环状多醚的总称。命名时,把环上所含原子的总数标注在“冠”字之前,其中所含氧原子数标注在名称之后。



15-冠(醚)-5
15-crown-5



二苯并-18-冠(醚)-6
dibenzo-18-crown-6

6. 立体化学

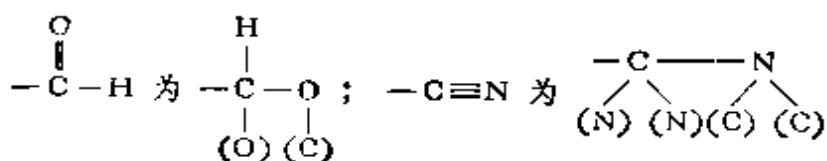
6.1 次序规则 (sequence rule)

为了表达某些立体化学关系,须决定有关原子或集团的排列次序,其方法叫次序规则。主要内容如下:

(1) 将各种取代基的原子按其原子序数大小排列,大者为“较优”基团。若为同位素,则质量高的定为“较优”基团。例如: $\text{Cl} > \text{O} > \text{C} > \text{H}$; $\text{D} > \text{H}$ (其中“ $>$ ”表示“优于”)。

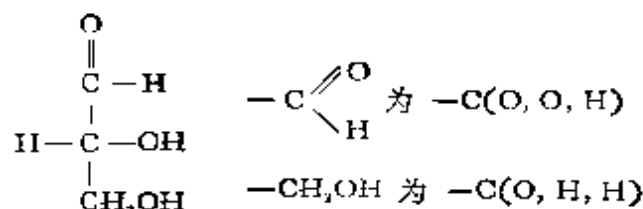
(2) 如果两个基团的第一个元素相同(例如碳),则比较与它直接相连的几个原子。比较时,按原子序数排列,先比较各组中最大者;若仍相同,再依次比较第二、第三个。例如 $\text{Cl}, \text{H}, \text{H} > \text{O}, \text{O}, \text{C}$; $\text{Cl}, \text{O}, \text{H} > \text{Cl}, \text{C}, \text{C}$ 。若仍相同,则沿取代链逐次相比(见后面乙烯基与异丙基的比较)。

(3) 含有双键和三键基团,可以认为连有两个或三个相同原子。

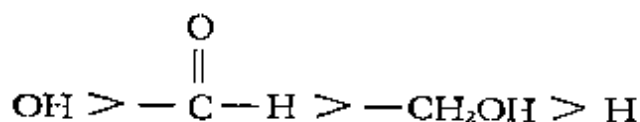


例:

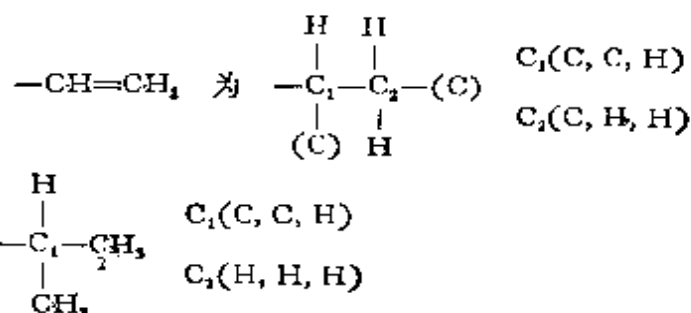
①



中心碳的四个取代基次序为:

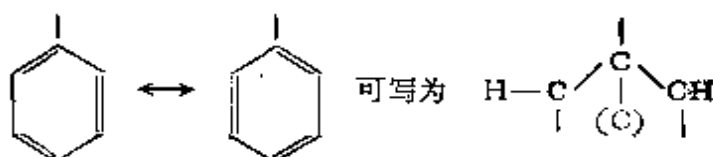


② 乙烯基和异丙基:

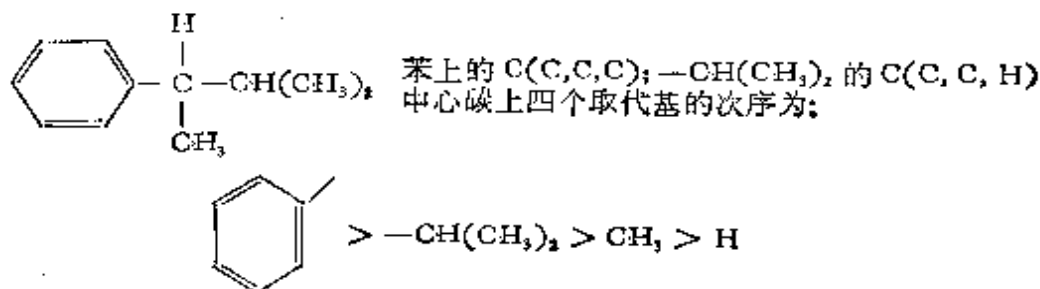


两个基团的 C_1 相同, C_2 不同, $(\text{C}, \text{H}, \text{H}) > (\text{H}, \text{H}, \text{H})$ 则乙烯基优于异丙基。

③ 芳环按 Kekulé 结构处理:


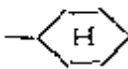

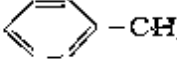
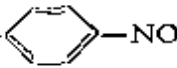
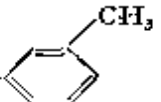


例:

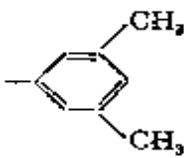
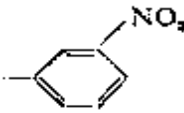
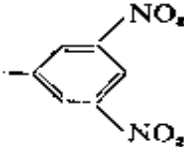
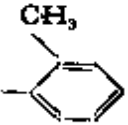
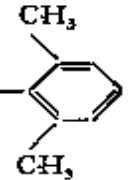
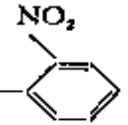
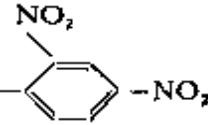


(4) 若原子的键不到四个(氢除外),可以补加原子序数为零(其次序排在最后)的“假想原子”,使之达到四个,在一些骨架固定的含氮化合物,氮的“孤电子对”即属此种情况。

下表列出 76 个原子或基团的优先顺序,编号较大者优于序号较低者。

| 编 号 | 基 团 名 | 构 造 式 |
|-----|-----------------------|--|
| 1 | 氢 (hydrogen) | —H |
| 2 | 甲基 (methyl) | —CH ₃ |
| 3 | 乙基 (ethyl) | —CH ₂ CH ₃ |
| 4 | 丙基 (propyl) | —CH ₂ CH ₂ CH ₃ |
| 5 | 丁基 (butyl) | —CH ₂ (CH ₂) ₂ CH ₃ |
| 6 | 戊基 (pentyl) | —CH ₂ (CH ₂) ₃ CH ₃ |
| 7 | 己基 (hexyl) | —CH ₂ (CH ₂) ₄ CH ₃ |
| 8 | 异戊基 (isopentyl) | —CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃) ₂ |
| 9 | 异丁基 (isobutyl) | —CH ₂ CH(CH ₃) ₂ |
| 10 | 烯丙基 (allyl) | —CH ₂ CH=CH ₂ |
| 11 | 新戊基 (neopentyl) | —CH ₂ C(CH ₃) ₃ |
| 12 | 2-丙炔基 (2-propynyl) | —CH ₂ C≡CH |
| 13 | 苄基(苯甲基) (benzyl) | —CH ₂ —  |
| 14 | 异丙基 (isopropyl) | —CH(CH ₃) ₂ |
| 15 | 乙烯基 (vinyl) | —CH=CH ₂ |
| 16 | 仲丁基 (sec.-butyl) | —CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃ |
| 17 | 环己基 (cyclohexyl) | —  |
| 18 | 1-丙烯基 (1-propenyl) | —CH=CHCH ₃ |
| 19 | 叔丁基 (tert.-butyl) | —C(CH ₃) ₃ |
| 20 | 异丙烯基 (isopropenyl) | —C(CH ₃)=CH ₂ |
| 21 | 乙炔基 (ethynyl) | —C≡CH |
| 22 | 苯基 (phenyl) | —  |
| 23 | 对甲苯基 (p-tolyl) | —  —CH ₃ |
| 24 | 对硝基苯基 (p-nitrophenyl) | —  —NO ₂ |
| 25 | 间甲苯基 (m-tolyl) | —  |

续表

| 编 号 | 基 团 名 | 构 造 式 |
|-----|--------------------------------|--|
| 26 | 3,5-二甲苯基 (3, 5-xylyl) |  |
| 27 | 间硝基苯基 (<i>m</i> -nitrophenyl) |  |
| 28 | 3,5-二硝基苯基(3, 5-dinitrophenyl) |  |
| 29 | 1-丙炔基 (1-propynyl) | $-\text{C}\equiv\text{CCH}_3$ |
| 30 | 邻甲苯基 (<i>o</i> -tolyl) |  |
| 31 | 2,6-二甲苯基 (2, 6-xylyl) |  |
| 32 | 三苯甲基 (trityl) | $-\text{C}(\text{C}_6\text{H}_5)_3$ |
| 33 | 邻硝基苯基 (<i>o</i> -nitrophenyl) |  |
| 34 | 2,4-二硝基苯基(2, 4-dinitrophenyl) |  |
| 35 | 甲酰基 (formyl) | $-\text{C}(=\text{O})\text{H}$ |
| 36 | 乙酰基 (acetyl) | $-\text{C}(=\text{O})\text{CH}_3$ |
| 37 | 苯甲酰基 (benzoyl) | $-\text{C}(=\text{O})\text{C}_6\text{H}_5$ |
| 38 | 羧基 (carboxy) | $-\text{C}(=\text{O})\text{OH}$ |

续表

| 编 号 | 基 团 名 | 构 造 式 |
|-----|---------------------------------|---|
| 39 | 甲氧羰基(甲酯基) (methoxycarbonyl) | $\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ -\text{C}-\text{OCH}_3 \end{array}$ |
| 40 | 乙氧羰基 (ethoxycarbonyl) | $\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ -\text{C}-\text{OCH}_2\text{CH}_3 \end{array}$ |
| 41 | 苄氧羰基 (benzyloxycarbonyl) | $\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ -\text{C}-\text{OCH}_2-\text{C}_6\text{H}_5 \end{array}$ |
| 42 | 叔丁氧羰基 (tert.-butoxycarbonyl) | $\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ -\text{C}-\text{OC}(\text{CH}_3)_3 \end{array}$ |
| 43 | 氨基 (amino) | $-\text{NH}_2$ |
| 44 | 铵基 (ammonio) | $-\overset{+}{\text{N}}\text{H}_3$ |
| 45 | 甲氨基 (methylamino) | $-\text{NHCH}_3$ |
| 46 | 乙氨基 (ethylamino) | $-\text{NHCH}_2\text{CH}_3$ |
| 47 | 苯氨基 (phenylamino) | $-\text{NH}-\text{C}_6\text{H}_5$ |
| 48 | 乙酰氨基 (acetyl amino) | $\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ -\text{NH}-\text{C}-\text{CH}_3 \end{array}$ |
| 49 | 苯甲酰氨基 (benzoylamino) | $\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ -\text{NH}-\text{C}-\text{C}_6\text{H}_5 \end{array}$ |
| 50 | 苄氧羰基氨基 (benzyloxycarbonylamino) | $\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ -\text{NH}-\text{C}-\text{OCH}_2-\text{C}_6\text{H}_5 \end{array}$ |
| 51 | 二甲氨基 (dimethylamino) | $-\text{N}(\text{CH}_3)_2$ |
| 52 | 二乙氨基 (diethylamino) | $-\text{N}(\text{CH}_2\text{CH}_3)_2$ |
| 53 | 三甲铵基 (trimethylammonio) | $-\overset{+}{\text{N}}(\text{CH}_3)_3$ |
| 54 | 苯偶氮基 (phenylazo) | $-\text{N}=\text{N}-\text{C}_6\text{H}_5$ |
| 55 | 亚硝基 (nitroso) | $-\text{N}=\text{O}$ |
| 56 | 硝基 (nitro) | $-\text{NO}_2$ |
| 57 | 羟基 (hydroxy) | $-\text{OH}$ |
| 58 | 甲氧基 (methoxy) | $-\text{OCH}_3$ |
| 59 | 乙氧基 (ethoxy) | $-\text{OCH}_2\text{CH}_3$ |
| 60 | 苄氧基 (benzyloxy) | $-\text{OCH}_2-\text{C}_6\text{H}_5$ |
| 61 | 苯氧基 (phenoxy) | $-\text{O}-\text{C}_6\text{H}_5$ |

续表

| 编 号 | 基 团 名 | 构 造 式 |
|-----|-----------------------------|---------------------------------|
| 62 | 葡萄糖基 (glucosyloxy) | |
| 63 | 甲酰氧基(甲酰基) (formyloxy) | —O—C(=O)—H |
| 64 | 乙酰氧基 (acetoxy) | —O—C(=O)—CH_3 |
| 65 | 苯甲酰氧基 (benzoyloxy) | $\text{—O—C(=O)—C}_6\text{H}_5$ |
| 66 | 甲基亚磺酰氧基 (methylsulfinyloxy) | —O—S(=O)—CH_3 |
| 67 | 甲基磺酰氧基 (methylsulfonyloxy) | $\text{—OSO}_2\text{CH}_3$ |
| 68 | 氟 (fluoro) | —F |
| 69 | 巯基 (mercapto) | —SH |
| 70 | 甲硫基 (methylthio) | —SCH_3 |
| 71 | 甲基亚磺酰基 (methylsulfinyl) | —S(=O)—CH_3 |
| 72 | 甲基磺酰基 (methylsulfonyl) | $\text{—SO}_2\text{CH}_3$ |
| 73 | 磺基 (sulfo) | $\text{—SO}_3\text{H}$ |
| 74 | 氯 (chloro) | —Cl |
| 75 | 溴 (bromo) | —Br |
| 76 | 碘 (iodo) | —I |

6.2 顺、反异构

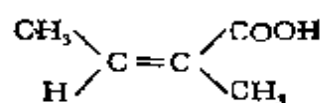
顺、反异构包括双键和环状化合物的顺、反异构体, 根据原子或取代基彼此在双键平面或环骨架平面的同侧和异侧而定。

(一) 双键的顺、反异构

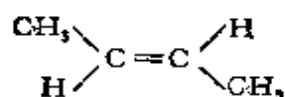
(1) 如果双键上一个碳原子连接的“较优”原子或基团与另一个碳原子连接的“较优”原子或基团(参阅 6.1 节次序规则的规定), 在双键平面同侧时, 其构型用 *Z* (德文 *zusammen*) 表示。在双键平面异侧时, 其构型用 *E* (德文 *entgegen*) 表示。*Z*、*E* 写在括号里放

在化合物名称的前面。

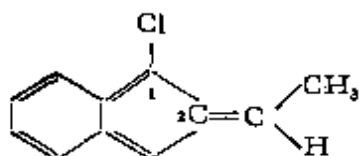
例:



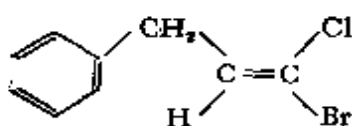
(Z)-2-甲基-2-丁烯酸



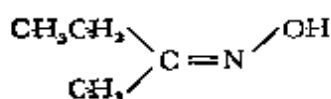
(E)-2-丁烯



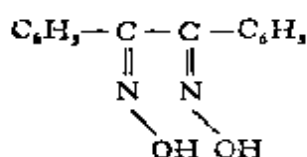
(Z)-2-亚乙基-1-氯-2H-萘



(E)-(3-氯-3-溴代烯丙)苯



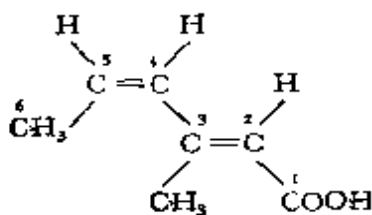
(Z)-丁酮脒



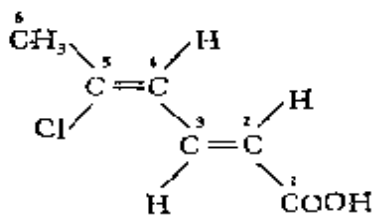
(Z, E)-联苯醌二脒

(2) 化合物中含有一个以上双键时, 每个双键按照(1)的规定确定 Z、E。命名时将 Z、E 写在相应双键位次标号的后面, 低位次的标号在前, 高位次标号在后, 放在化合物名称的前面。

例:

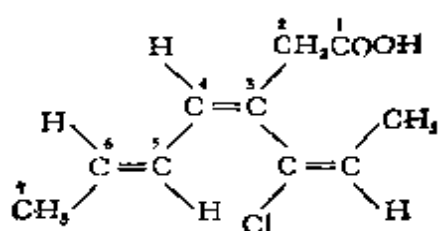


(2E, 4Z)-3-甲基-2, 4-己二烯酸

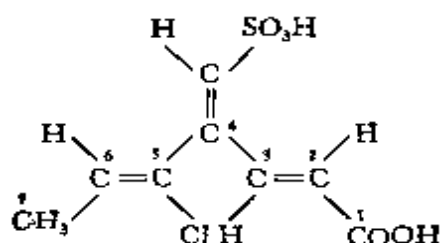


(2E, 4Z)-5-氯-2, 4-己二烯酸

若双键作为取代基时, 则符号 Z、E 置于取代基名称之前。



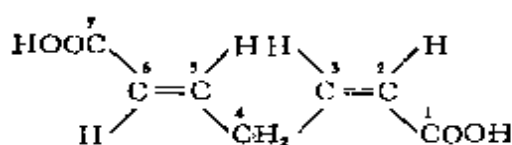
(3Z, 5E)-3-[(E)-1-氯-丙烯]-3, 5-庚二烯酸



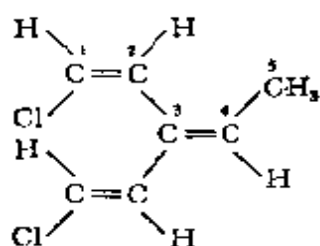
(2E, 5Z)-4-[(E)-磺酸亚甲基]-5-氯-2, 5-庚二烯酸

当多烯烃主链的编号在遵循“使双键的编号尽可能小”的原则(见 2.13 节)以外,若有选择时,则规定编号由 Z 型双键端开始。

例:



(2Z, 5E)-2, 5-庚二烯二酸



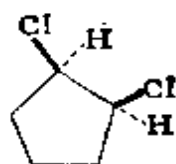
(1Z, 3Z)-3-[(E)-2-氯乙烯基]-1-氯-1, 3-戊二烯不叫 (1Z, 4E)-3-[(Z)乙亚基]-1, 5-二氯-1, 4-戊二烯

(注 Z > E)

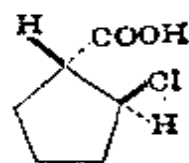
(二) 单环的顺、反异构

(1) 单环上两个相邻位置分别接一个取代基时,其立体关系用顺、反 (cis, trans) 表示,置名称之前,并后加“-”半字线。

例:



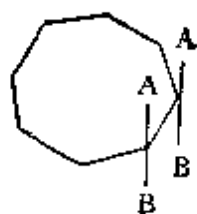
顺-1, 2-二氯环戊烷



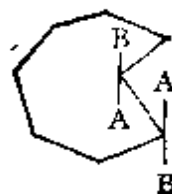
反-2-氯环戊烷羧酸

规定环应以扩张状态表示,不应有凹角,以免得出相反的立体关系。

例:



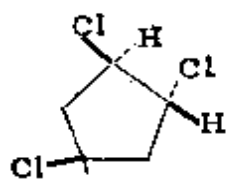
顺式(正确)



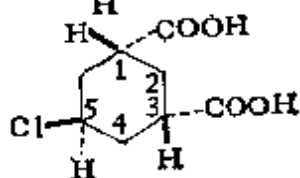
(错误的表示法)

(2) 环上有两个以上的位置各有一个取代基时,则择定其中位次最低者为对照基团,在其位次前加“*r*”(reference)标示,而其余取代基位次前用顺、反来表示它们与“对照基团”的立体关系。

例:



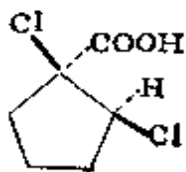
r-1, 反-2, 顺-4-三氯环己烷



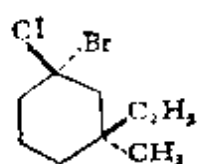
r-1, 反-5-氯, 顺-3-环己二甲酸

(3) 同一碳上有两个不同的取代基时,则把作为名称字尾的取代基定为“对照基团”,其所在位次应尽可能低;若化合物无名称词尾的取代基,则择其所在位次最低的一对取代基,按次序规则,定“较优基团”为对照基团;对其它位置上的取代基,只择其“较优基团”用顺、反来表示它们与对照基团的立体关系。

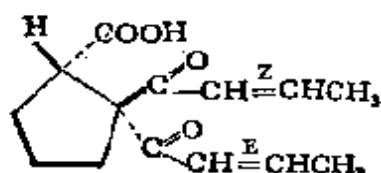
例:



1, 反-2-二氯-*r*-1-环戊烷甲酸



3-甲基-反-3-乙基-1-氯-*r*-1-溴环己烷

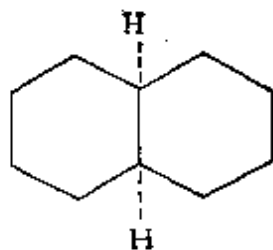


2-巴豆酰-反-2-异巴豆酰-*r*-1-环戊烷甲酸(*Z*>*E*, 异巴豆酰优于巴豆酰)

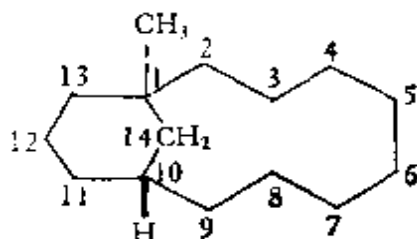
(三) 稠环的顺、反异构

(1) 桥烃的两个桥头之间的立体关系, 也用顺、反表示; 其联接方式称为顺联和反联。

例:



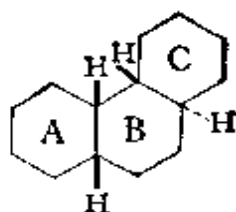
顺-十氢萘



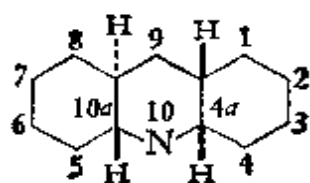
1-甲基-反-二环[8.3.1]十四烷

(2) 当饱和的桥头原子多于一对时, 表示方法基本同桥烃, 必要时在紧随“顺、反”和半字线之后, 标出桥头原子的位次。而两对桥头之间的立体关系由相距最近距离 (指两桥原子之间所连接的原子数最少的距离) 来决定, 用顺型 (cisoid) 和反型 (transoid) 描述, 其后也加半字线, 必要时在其后也标出桥头原子的位次。

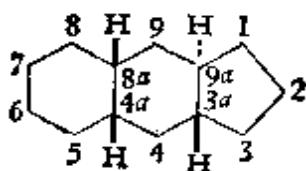
例:



顺-顺型-反-全氢菲



顺-顺型-4 α , 10 α -反-全氢吡啶
或 *rel*-(4 α S, 8 α S, 9 α S, 10 α R) 全氢吡啶



反-3 α -顺型-3 α , 4 α -顺-4 α -全氢苯并[f]
萘或 *rel*-(3 α R, 4 α S, 8 α R, 9 α R)-全氢苯
并[f]萘

(有关 *R*, *S* 规则见下节)

两对桥头原子之间的距离相同时, 则以最低位次标示。复杂情况, 则用次序规则。

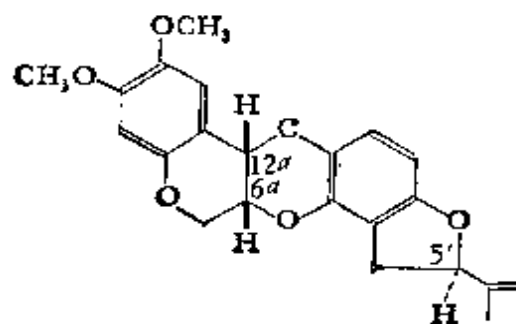
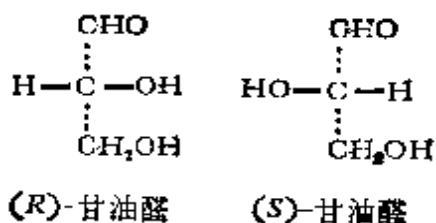
6.3 手性中心的构型表示法

(一) 旋光异构体的旋光方向用右旋(+), 左旋(-)及内消旋表示。

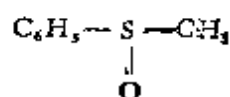
(二) 根据次序规则, 用 *R*, *S* 符号表示手性原子的构型:

(1) 若手性碳原子连接的四个不同的基团 *a*, *b*, *c*, *d* 按次序规则排列的先后次序为 $a \rightarrow b \rightarrow c \rightarrow d$, 则把 *d* 作为手性碳原子四面体的顶端, *a*, *b*, *c* 为四面体底部的三角, 然后从四面体底部向顶端方向看 $a \rightarrow b \rightarrow c$ 的排列顺序, 如为顺时针排列, 称为 *R* 型; 若为逆时针方向排列, 则称 *S* 型 (*R*, *S* 分别为拉丁文 Rectus, Sinister 的缩写, 意为“右”、“左”)。

例:



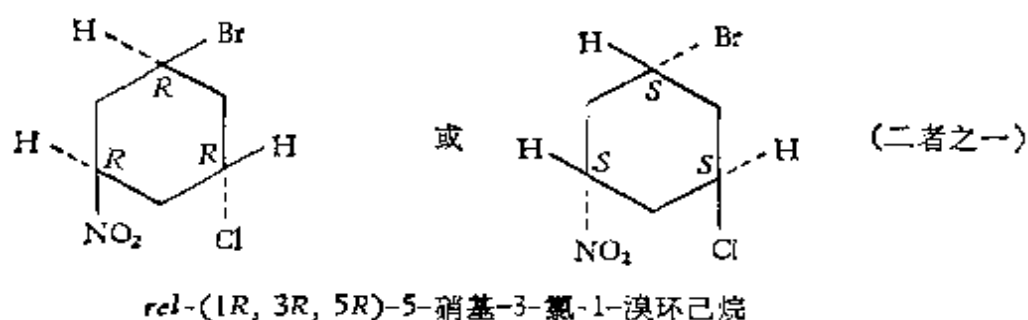
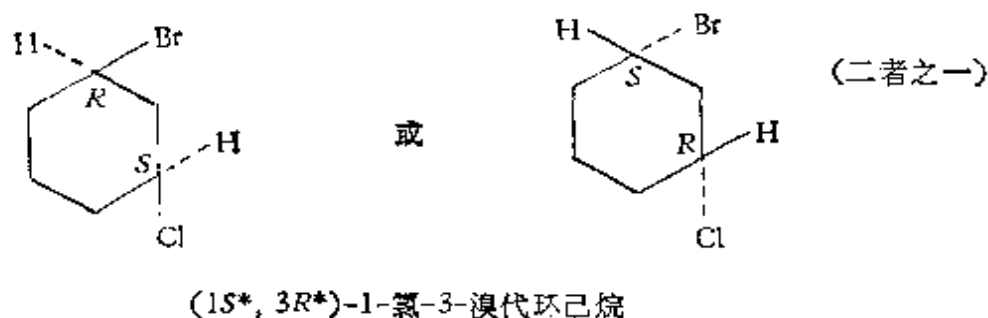
(6 α S, 12 α S, 5'*R*)-鱼藤酮



甲基·苯基(R)亚砜

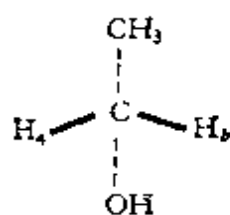
(2) 相对构型已知, 绝对构型未知时, 用 R^* , S^* 表示, 前面标示位次; 在比较复杂情况时, 可省去星号, 而在总名称前用 *rel* (relative) 字头表示。

例:

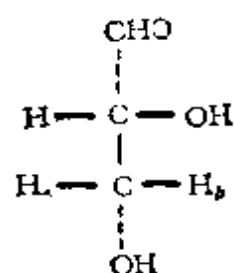


(3) 在一个分子中可能有几个手性中心, 这些中心可能结构相同或不同; 也可能两个手性中心结构相同而其手性相反, 则整个分子是无手性的。

在一个化合物中, 其无手性中心 (或原子) 所连接的两个相同的原子或基团 (如 63 页 (A) 或 (B) 图中 H_a 及 H_b) 若被看作不同时, 则将导致手性, 此中心称为前手性 (prochirality)。这两个相同的原子或基团实际上是有立体化学的区别, 是异位的 (heterotopic)。如果前手性的亚甲基中的一个氢被氘取代, 则亚甲基的碳即为真正的手性中心, 此时化合物 (A) 为手性的, (B) 为两个非对映异构体中的一个。因此 (A) 中的前手性氢 H_a 及 H_b 为对映异位 (enantiotopic), (B) 中的前手性氢 H_a 及 H_b 为非对映异位 (diastereotopic)。



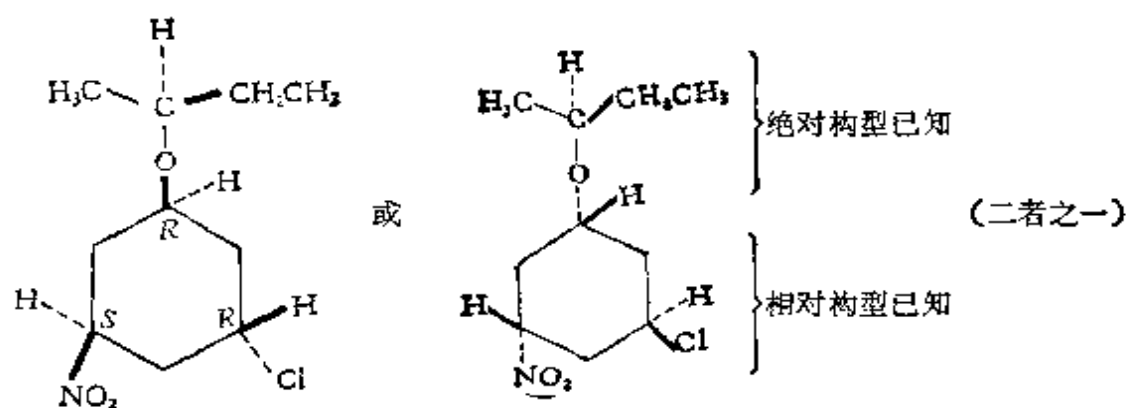
(A)



(B)

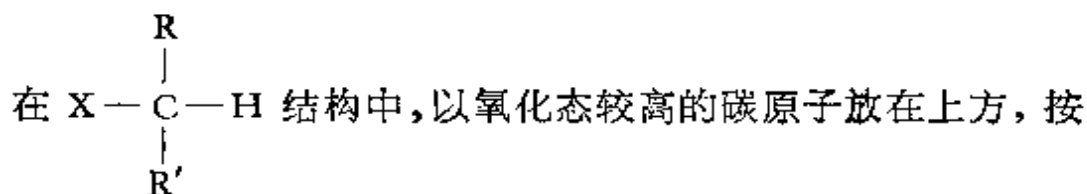
(4) 在相对构型已知的化合物中, 引入绝对构型已知的取代基时, 相对构型部分用 R^* 、 S^* 表示, 而不用 *rel.*

例:



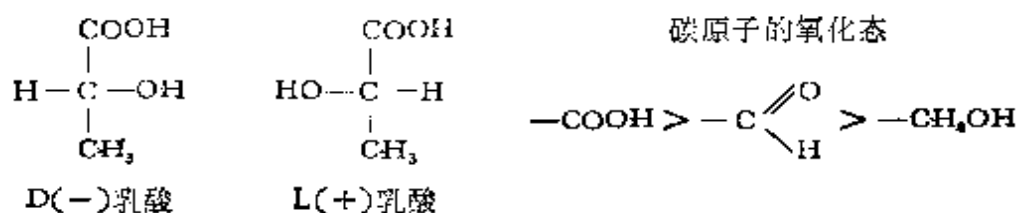
(三) 用 D、L 或俗名表示:

氨基酸、肽类、糖类、环多元醇及其衍生物的立体化学命名, 用 D、L 或俗名表示; 甾体用 α 、 β 和俗名表示; 萜类及生物碱, 当其绝对构型已知时, 用顺、反表示。当骨架上一系列双键均属同一立体化学类型时, 则用全顺或全反表示(详见 8 章)。



Fischer 投影法所得投影中, X 在右侧或左侧, 分别称为 D 型或 L 型。

例:

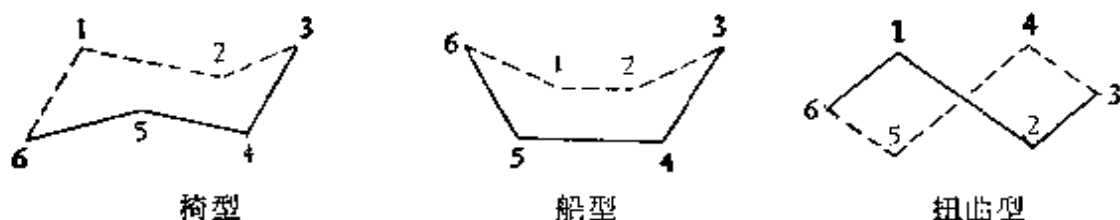


6.4 构 象

(一) 椅型与船型:

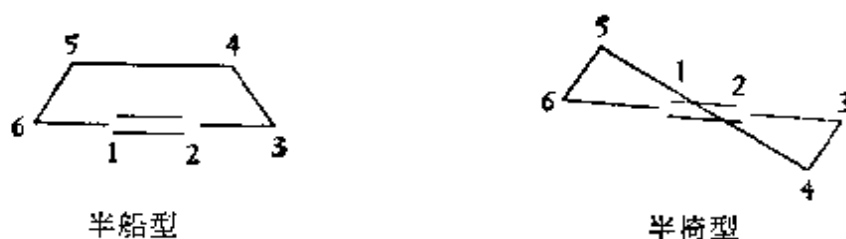
(1) 饱和六元环的六个原子中,若其中 1, 2, 4, 5 位四个原子处于同一平面内,则把 3, 6 位原子位于该平面异侧和同侧的构象,分别称为椅型和船型: 由一种船型转变为另一种船型的中间构象,即 1, 2, 4, 5 位的四个原子不再是共平面时,称为扭曲型。

例:



(2) 当六元环含有一个双键时,与双键不直接相连的 4, 5 位两个原子与双键以平行或交叉形式存在,分别称其构象为半船型和半椅型。

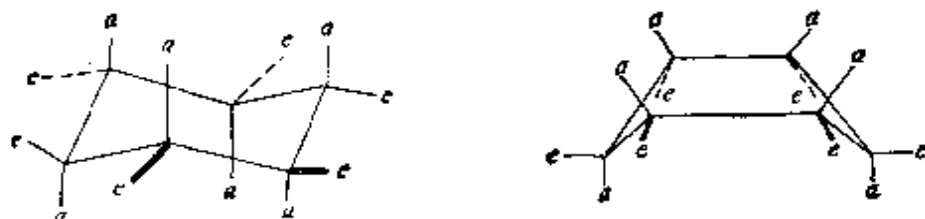
例:



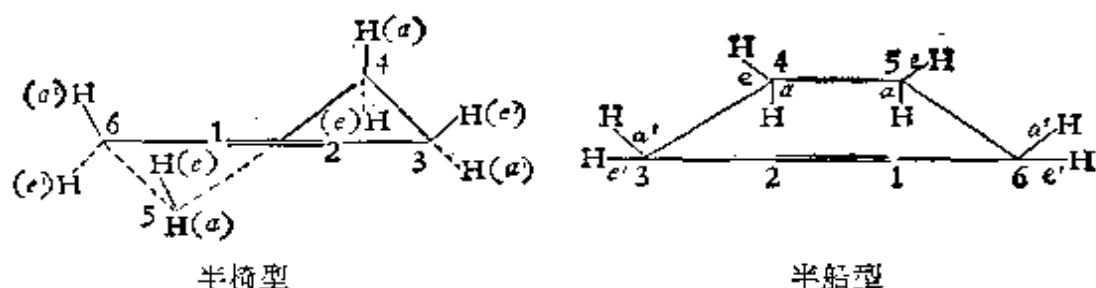
(二) 平伏键与直立键:

(1) 在船型和椅型构象中,与六元环中的正四面体原子相连的键,按其与环内多数原子构成的平面所成的夹角较大者称为直立键,较小者称为平伏键,分别以 α 和 e (axial 和 equatorial) 表示,命名时标示在所在位次后的括号内。

例:



(2) 在半船型和半椅型构象中, 3, 6 位上有类似的 a 和 e 键, 分别称为假直立键和假平伏键, 并分别用 a' 和 e' 表示: 4, 5 位上的键仍以 a, e 表示。



(三) 用扭转角描述分子构象的空间排列:

构象用 Newman 投影描绘由于单键旋转而产生的、非键合基团之间的夹角称为扭转角, 用 θ 或 ω (希文) 表示, 顺时针旋转的角为正值, 反时针旋转的角为负值。扭转角及其构象名称、符号见下表:

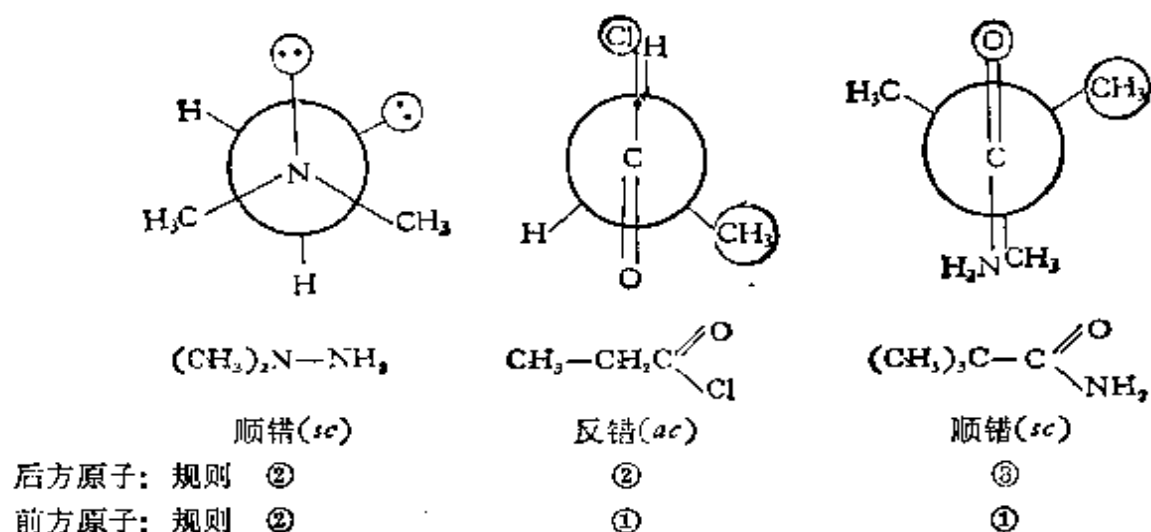
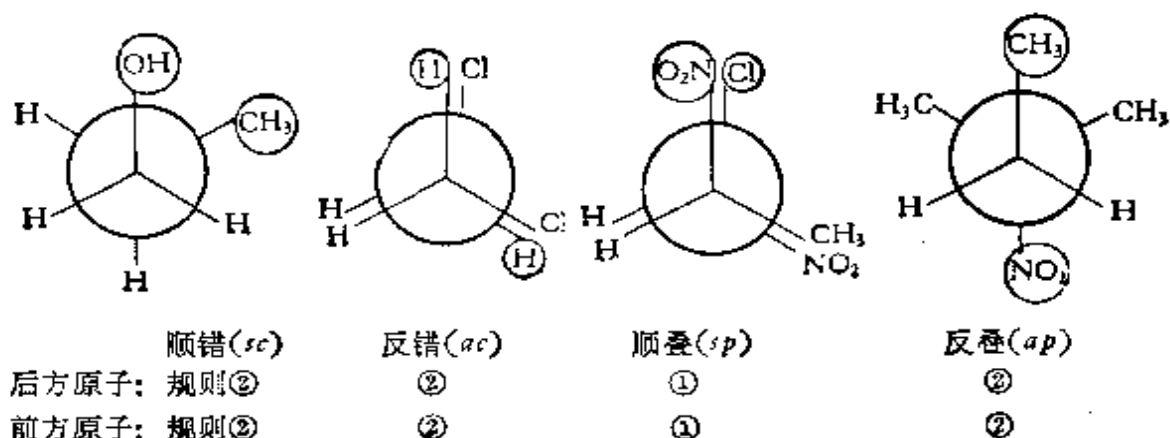
| 扭转角 θ^* | 0° | $\pm 60^\circ$ | $\pm 120^\circ$ | $\pm 180^\circ$ |
|----------------|-------------------------|---------------------|----------------------|--------------------------|
| 构象名称 | 顺叠 | 顺错 | 反错 | 反叠 |
| 符 号 | sp (synperiplanar) | sc (synclinal) | ac (anticlinal) | ap (antiperiplanar) |
| 举 例 | | | | |

* 各种扭转角均有 $\pm 30^\circ$ 的幅度。

Newman 投影扭转角的确定是取决于前后两个原子上的取代基,根据以下规则择定取代基:

- ① 取代基都不同时,按次序规则选定“较优基团”。
- ② 两个取代基相同时,选择第三个取代基。
- ③ 取代基都相同时,则采用最小的扭转角。

例:



注: 图用加圈的基团是根据上面的三条原则择定的取代基; 圈内的“..”表示孤电子对, 视作最小取代基, 原子序数定为零。

7. 变丰化合物

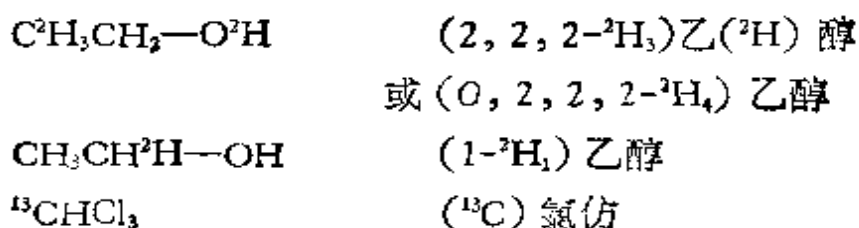
有些元素有几种核素 (nuclide), 例如 ^1H , ^2H , ^3H (氕, 氘, 氚) 就是氢的三种核素。若化合物中至少有一种核素的丰度与天然比

例有所不同,即称为变丰化合物。

7.1 同位素取代化合物

若在所有的分子中,某一(或 n 个)指定的位置上的某一(或 n 个)元素均(基本上 100%)为某核素所占据,而在其他位置上的核素组成仍为天然丰度,则称同位素取代化合物。命名时将位次标号及核素符号连同必要的下标数字都放在圆括号内。

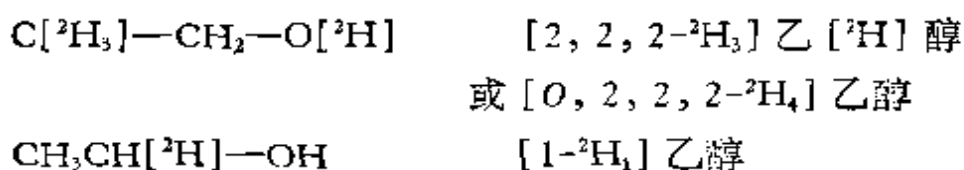
例:



7.2 特定标记化合物

在实践中往往难于达到 100% 的标记程度。若除同位素取代化合物(只含一种)外,尚有所稀释(即含天然丰度的分子*),则该混合物为特定标记化合物。命名法与上法相同,但改用方括号。

例:



上面所举 [1- 2H_1] 乙醇的例子,虽然样品有可能是高度稀释的(即,绝大部分是未标记的普通乙醇),但所有的标记分子的亚甲基都只含一个氘,不杂有二氘标记者。

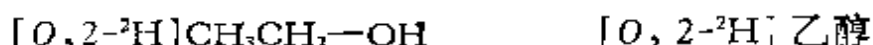
7.3 选择性标记化合物

在制备操作中,有时也很难得到特定标记的化合物。一般情

* 系指宏观的丰度比值而言。若从单个分子来看,所谓天然丰度的样品其实仍然是一个混合物。

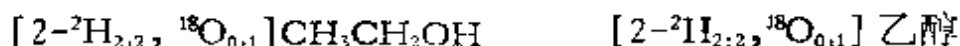
况下,往往只能确定标记的位置,但不一定能够确定每一种核素的数目。这种样品称之为选择性标记化合物。可以看出,样品中所含同位素取代化合物有一种以上。由于杂有普通的未标记的分子(往往是大量的),当然也可以认为是几个特定标记化合物的混合物。命名时仍用方括号,须省去下角数码。

例:



表明除 OH 有氘标记外,甲基也被标记,但甲基有一氘代,二氘代,三氘代等三种情况(或有其中之一;若只有一种且为单氘代,在与羟基丰度相同时,则成特定标记化合物)。有时也需加下角数码。

例:



表明样品中除普通乙醇外,还含有两种同位素取代的分子,其一为 $CH_3^2H_2CH_2OH$, 另一为 $CH_3^2H_2CH_2-^{18}OH$ 。

7.4 非选择性标记化合物

若标记位置不明确,称为非选择性标记化合物。命名时只用核素符号放在方括号里表示。

例:



表明在甲基,亚甲基及羟基上均可能有所标记。

7.5 全标记化合物

除普通分子外,在全部位置上均无例外地有所标记,则以 G (General) 表示。

例:



表示不一定含有四个碳同时被标记的丁酸分子。只是在混合物中全部位置均有所标记,而无遗漏。

7.6 均匀标记化合物

在分子中,除全部位置上有所标记外,其各个位置标记的宏观丰度比值也相同,称为均匀标记。以 U(uniform) 表示之。

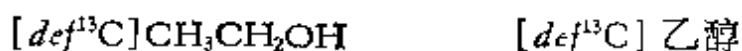
例:



7.7 贫同位素化合物

若某一核素低于天然丰度,为贫同位素化合物。可用 *def* (deficient) 表示。

例:



若按 7.4 节,也可命名为 $[^{12}\text{C}]$ 乙醇。

另有一套命名法,目前仍为《化学文摘》所沿用,一般文献中仍较常见。现仅举数例,介绍其氘、氟化合物的命名。

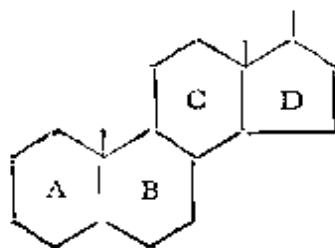
例:

| | |
|---|----------------------------|
| CH_3D | 甲烷- <i>d</i> |
| CD_4 | 甲烷- d_4 |
| CH_3CDO | 乙醛- <i>t</i> |
| $\text{CH}_2\text{DCH}_2\text{COOD}$ | 丙-3- <i>d</i> -酸- <i>d</i> |
| $2,4\text{-D}_2\text{C}_6\text{H}_3\text{COOH}$ | 苯-2,4- d_2 -甲酸 |

8. 天然化合物

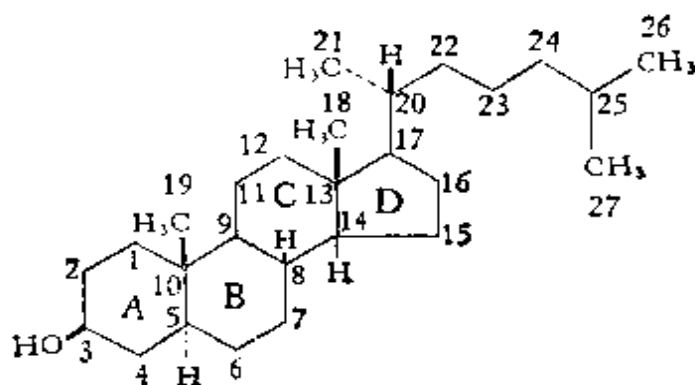
8.1 甾族化合物

凡具有以下碳骨架的化合物,称为甾族化合物。

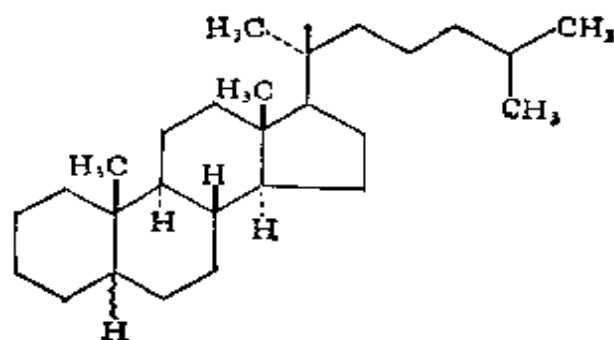


甾族化合物的命名是以前其烃类的基本结构作为母体名称并加上前、后缀表明取代基的位次和名称来构成。分子内的手性中心用 R 或 S 表示,取代基用 α 、 β 和 ξ 来表示其构型。

(一)碳环的字母及碳原子的编号。



5 α -胆甾烷-3 β -醇
(5 α -cholestan-3 β -ol)



5 ξ -胆甾烷
(5 ξ -cholestane)

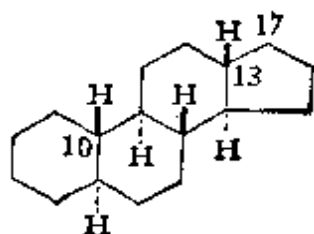
(二)与甾环相连的原子或基团的构型规定如下:

- (1) 在平面之下,称为 α 键,用虚线 (---) 表示。
- (2) 在平面之上,称为 β 键,用粗实线 (—) 表示。
- (3) 未知构型者,称为 ξ 键,用波线 (~~~~) 表示。

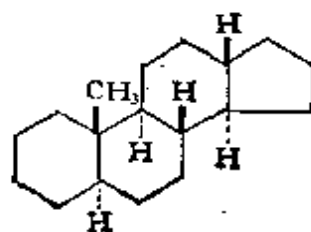
(三)所有环接合点,一定要用 H 和 CH_3 (或 Me) 表明。

(四)除非另有说明,甾族的命名包含在 8, 9, 10, 13, 14 和 17 的构型,5- H 常用 5 α , 5 β 或 5 ξ 表明。

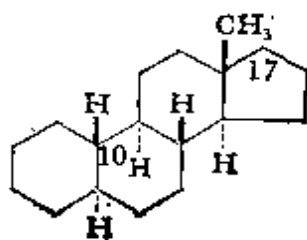
(五)基本甾环的命名 (5 α -系列)。



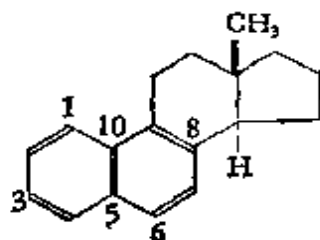
5 α -腺甾烷 (C-10, 13, 17 无取代基)
(5 α -gonane)



18-失碳-5 α -雄甾烷
(18-nor-5 α -androstane)



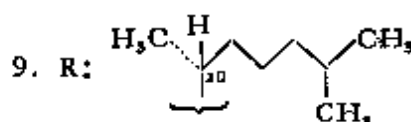
5 α -雌甾烷 (C-10, 17 无取代基)
(5 α -estrane)



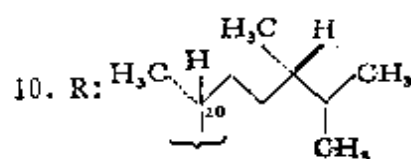
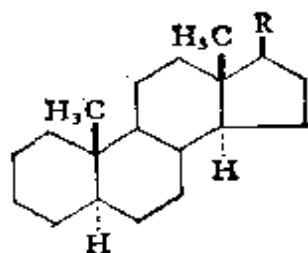
1, 3, 5(10), 6, 8-雌甾五烯
(1, 3, 5(10), 6, 8-estrapentaene)

7. R: H 5 α -雄甾烷 (5 α -androstane)

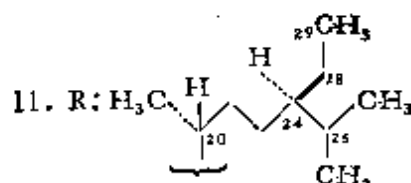
8. R: C₂H₅ 5 α -孕甾烷 (5 α -pregnane)



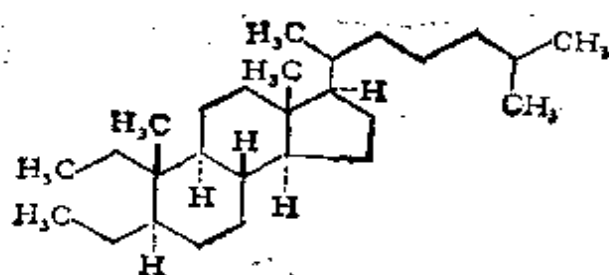
5 α -胆甾烷* (5 α -cholestane)
[5 β -胆甾不叫粪甾 (coprostan)]



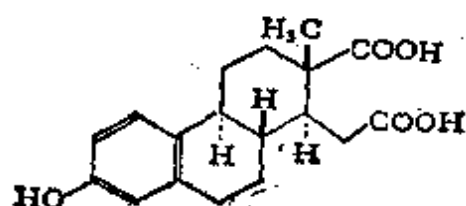
5 α -麦角甾烷**
(5 α -ergostane)



(七)开环：甾环裂开用字头开环或裂 (seco) 表示。



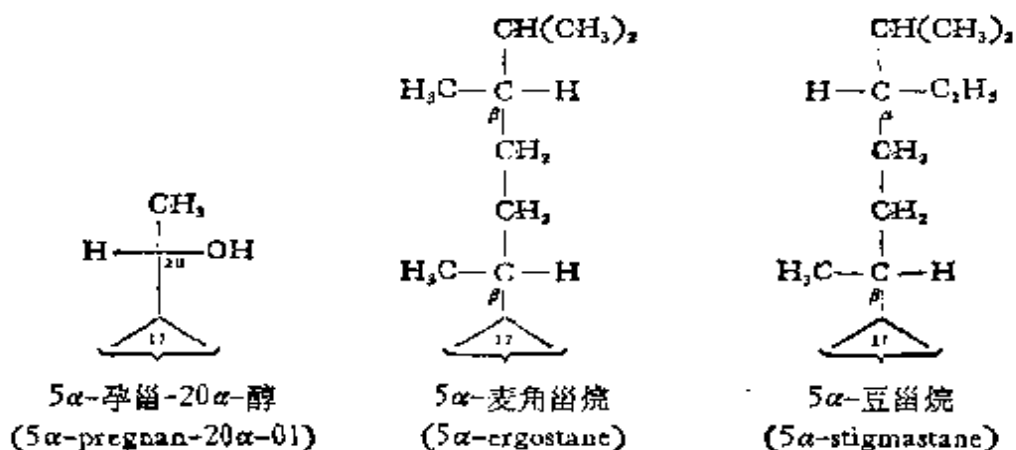
2, 3-开环(或裂)-5 α -胆甾烷
(2, 3-seco-5 α -cholestane)



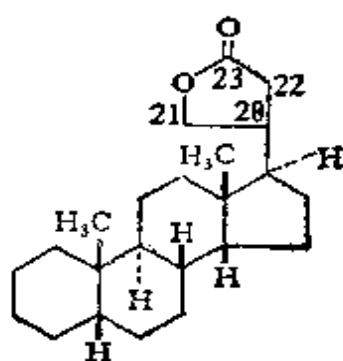
3-羟基-16, 17-开环-1, 3, 5(10)-雌甾三烯-16, 17-双酸
[3-hydroxy-16, 17-seco-1, 3, 5(10)-estratriene-16, 17-dioic acid]

(八)几个惯例:

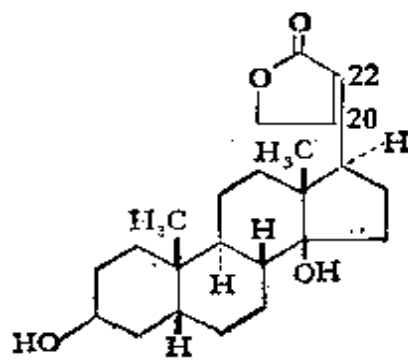
(1) 在孕甾烷中, C-20 的构型: 当侧链给以 Fischer 投影, 最大编号的碳应处顶部, 则取代基在 C-20 右侧者称为 α , 反之称为 β 。



(2) 心甾内酯。用于完全饱和系统的类毛地黄内酯。C-5 和 C-14 的构型必需指明; 天然存在的不饱和内酯, 用心甾烯内酯并用阿拉伯数字标明烯键的位置。

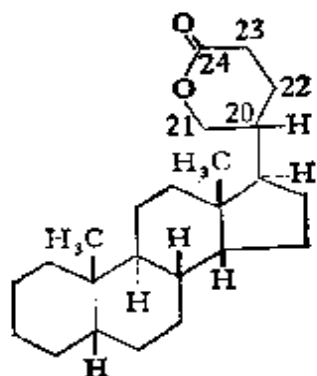


5 β , 14 β -心甾内酯
(5 β , 14 β -cardanolide)

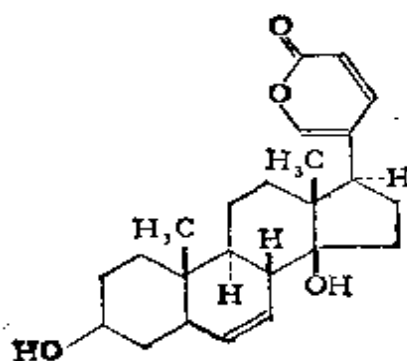


3 β , 14-双羟基-5 β , 14 β -心甾-
20(22)-烯内酯(=毛地黄苷元)
[3 β , 14-dihydroxy-5 β , 14 β -card-
20(22)-enolide(=digitoxigenin)]

(3) 蟾甾内酯。用于完全饱和系统的海葱-蟾蜍属内酯；C-5、C-14 构型必须说明。蟾甾双烯内酯、蟾甾三烯内酯等用于天然存在的含有二个或三个双键的不饱和内酯。

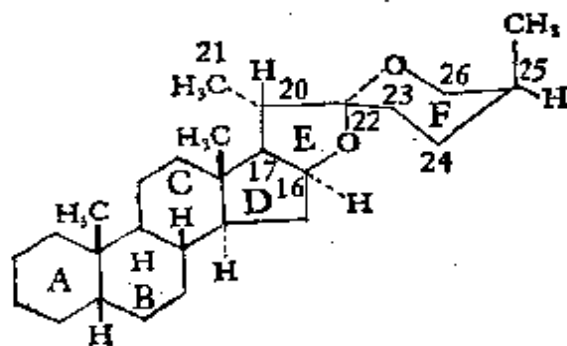


5 β , 14 β -蟾甾内酯
(5 β , 14 β -bufanolide)

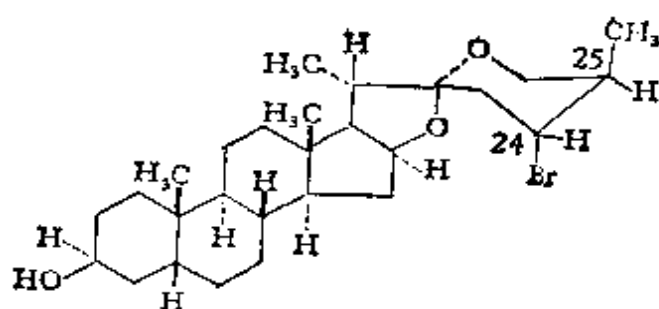


3 β , 14-双羟基-14 β -蟾甾-6, 20, 22-
三烯内酯(=海葱苷元)
[3 β , 14-dihydroxy-14 β -bufa-6, 20, 22-
trienolide(=scillarenin)]

(4) 螺甾。下列结构命名时,必须标明 C-5、C-25 的构型。

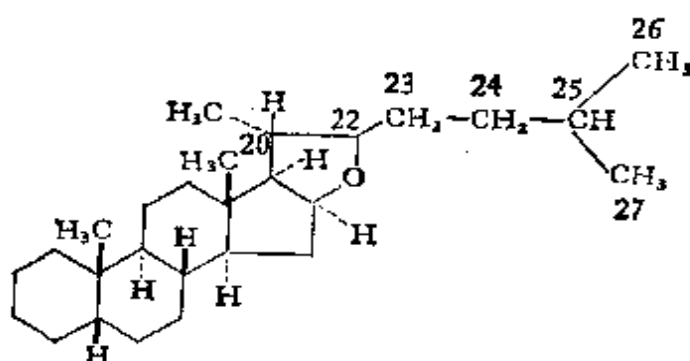


(25S)-5 β -螺甾烷
[(25S)-5 β -spirostan]

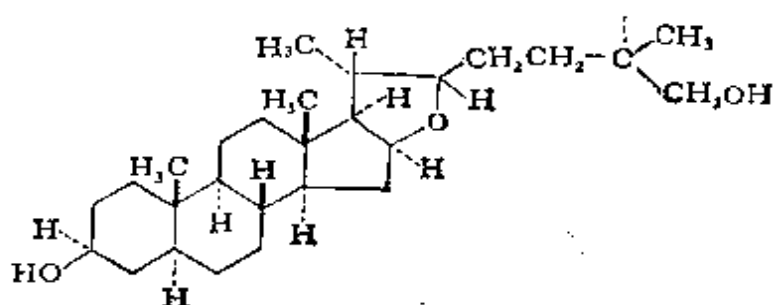


(24R, 25R)-24-溴-5 β -螺甾-3 β -醇
 [(24R, 25R)-24-bromo-5 β -spirostan-3 β -ol]

(5) 呋甾。下列结构命名时必须标明 C-5、C-22 及 C-25 的构型。

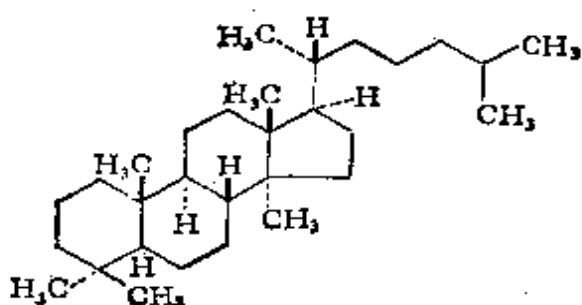


(22R)-5 β -呋甾烷
 [(22R)-5 β -furostan]

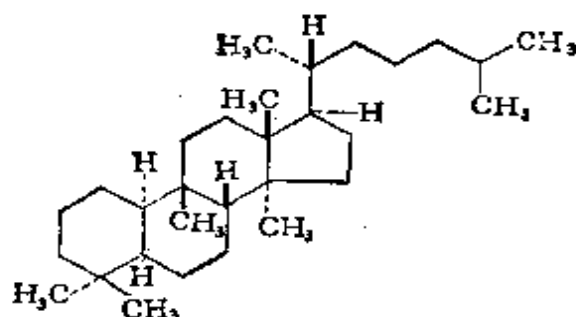


(20S, 22 ξ , 25R)-5 α -呋甾-3 β , 26-二醇(=双氢假惕告吉宁)
 [(20S, 22 ξ , 25R)-5 α -furostan-3 β , 26-diol(=dihydroxypseudotigogenin)]

(6) 四环三萜视为三甲基甾体。三个外加甲基的编号为 30、31、32，它们分别接于 C-4 (α 型)、C-4 (β 型) 和 C-14 (α 型)。



4, 4, 14 α -三甲基-5 α -胆甾烷(=羊毛甾烷)
[4, 4, 14 α -trimethyl-5 α -cholestane (=lanostane)]



19(10 \rightarrow 9 β)移-5 α , 10 α -羊毛甾烷(=5 α -葫芦烷)
[19(10 \rightarrow 9 β)abco*-5 α , 10 α -lanostane(=5 α -eucurbitane)]

* abeo-(Latin) 表示键移位

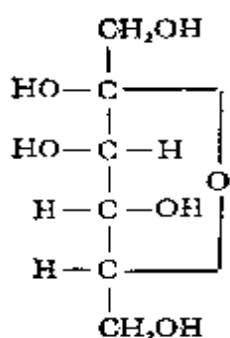
8.2 碳水化合物(即糖类化合物)

(一)基本结构与主体化学:

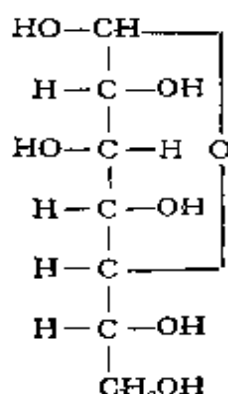
具有多羟基醛或酮的结构, 通称为糖。简单的单糖, 如赤藓糖、阿(拉伯)糖、核糖、葡萄糖等命名以俗名为主。并用特定的前缀符号或前缀词表示主体化学结构的性质。

α -, β -表示糖苷碳原子的构型; D-, L-表示序号最高的手性碳原子的绝对构型; 赤藓-等前缀词表示有关碳原子的相对构型。

另外, 也可用以词尾表示该化合物归属的种类的方法命名。例如呋喃糖、酮糖、糖酸等



β -D-果糖
或 β -D-阿拉伯-2-己酮呋喃糖



β -D-甘油-D-葡萄糖吡喃糖

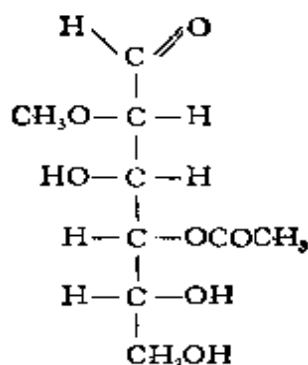
(二)取代衍生物:

(1) 糖分子内羟基上的氢被取代时,可直接使用该取代基的化学名称。

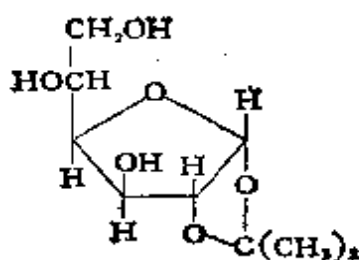
(2) 糖分子内的羟基被氢取代,以“脱氧”表示;羟基被其它基团取代的,则在“脱氧”之前加上取代基的名称。

(3) 呋喃环或吡喃环上半缩醛的羟基称(糖)苷羟基,该羟基中的氢被某一基团取代后生成的化合物称(糖)苷。取代基团则称为配糖基;糖的部分则称为糖苷基;全名的形式为某糖某苷。

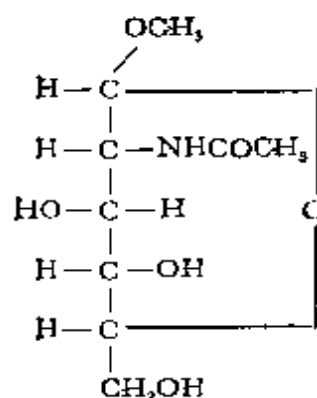
例如:



2-O-甲基-4-O-乙酰-D-甘露糖



1,2-O-异亚丙基- α -D-葡萄糖呋喃糖



N-乙酰- α -D-氨基葡萄糖甲苷或2-乙酰氨基-2-脱氧- α -D-葡萄糖呋喃糖甲苷

(三)还原和氧化产物:

(1) 单糖的醛基被氢化成羟基后称为糖醇。

(2) 单糖的醛基或半缩醛基被氧化成羧基后称为糖酸。

- (3) 伯醇基被氧化成羧基的单糖,称为糖尾酸。
 (4) 单糖分子的二端若都变为羧基,则称之为糖二酸。

8.3 核 酸

核酸有两大类:一是核糖核酸,也可用 RNA 表示。二是脱氧核糖核酸,也可用 DNA 表示。它们都是生物大分子化合物,分别由核苷酸和脱氧核苷酸组成。

核苷酸由氮杂环碱基、核糖苷基和磷酸基三部分组成。各个不同核苷酸的命名,取碱基的字头,加“核苷酸”而成。如腺(核)苷酸、胞(核)苷酸等。脱氧核苷酸的命名方法与核苷酸相同,并加前缀词“脱氧”。例如脱氧腺(核)苷酸、脱氧胞(核)苷酸等。

核苷由氮杂环碱基和核苷基组成,其命名除了无磷酸外,其余均与核苷酸相同。如腺(核)苷、脱氧腺(核)苷等。

上述名称中的“核”字,一般可以省略,但若为区别于其它糖苷基组成的类似物时,则不能省。如腺核糖苷、腺阿拉伯糖苷、胞葡萄糖苷等。

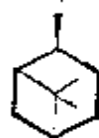
8.4 萜类化合物

萜类环系的命名按英文俗名意译,再接上一个“烷”字。有少数名称沿用英文音译(第一节音译加“烷”字)已久,则在括弧内加以注明。

例:



对薄荷烷
(对蓝烷)
(*p*-menthane)



松节烷
(蒎烷)
(pinane)

(一)部分单萜类环系:

(1) 无环型:

月桂烷 薰衣草烷 艾蒿烷 异艾蒿烷
(myrceane) (lavendulane) (artemisane) (iso-artemisane)

(2) 单环型:

环异艾蒿烷 菊化烷 光月桂烷
(cycloiso-artemisane) (chrysanthemane) (photomyrceane)
桂花烷 异香芹烷 别香芹烷 维奥拉烷 柯斯塔烷
(osmane) (iso-carvane) (allo-carvane) (violacane) (costalane)
新侧柏烷 兰按烷 别侧柏烷 光樟烷
(neo-thujane) (globulane) (allo-thujane) (photocamphane)
对薄荷烷(对莰烷) 间薄荷烷 光薷烷 异光薷烷
(*p*-menthane) (*m*-menthane) (photocarane) (iso-photocarane)
邻薄荷烷 环香叶烷 异环香叶烷 优香芹烷
(*o*-menthane) (cyclogeiraniene) (iso-cyclogeiraniene) (eucarvane)
西红檀烷 异西红檀烷
(thujaplicane) (iso-thujaplicane)

(3) 二环型

侧柏烷(萜烷) 薷烷 松节烷(蒎烷) 樟烷(莰烷; 蒎烷)
(thujane) (carane) (pinane) (camphane, bornane)
异樟烷(异莰烷) 小茴香烷(葑烷) 异小茴香烷(异葑烷)
(iso-camphane) (fenchane) (iso-fenchane)
新小茴香烷(新葑烷) 别小茴香烷(别葑烷)
(neo-fenchane) (allo-fenchane)
异光月桂烷 光柠檬烷 光侧柏烷 光优香芹烷
(iso-photomyrceane) (photocitrene) (photothujane) (photoeucarvane)
异光优香芹烷
(iso-photoeucarvane)

(4) 三环型:

三环烷 环小茴香烷(环葑烷) 香芹樟烷
(tricyclane) (cyclofenchane) (carvonecamphane)

(二) 部分倍半萜类环系:

(1) 无环型:

金合欢烷

(farnesane)

(2) 单环型

烟霉烷 甜没药烷 甜旗烷 旋光烷 榄香烷

(fumagilane) (bisabolane) (calacane) (humbertiane) (elemane)

单环金合欢烷 旋复花烷 牻牛儿烷(吉马烷)

(monocyclofarnesane) (inulicane) (germacrane)

蛇麻烷(葎草烷) 环异戊基月桂烷 苍耳烷 花柏烷

(humulane) (cycloiso-pentylmyrceane) (xanthinane) (nootkatane)

天竺烷

(pelargonane)

(3) 二环型:

倍半萜烷 倍半樟烷(倍半莰烷) 倍半小茴香烷

(sesquicarane) (sesquicamphane) (倍半葑烷)

(sesquifenchane)

亥明苏烷 沉香螺旋烷 蜂斗菜烷 葎澄茄烷 白龙胆烷

(helminthosporane) (agarospirane) (fukinane) (cadinane) (laserane)

芹子烷 佛术烷 缬草烷 金钟烷 血菟烷

(selinane) (eremophilane) (valerane) (occidane) (iresane)

愈创烷 墨西哥烷 岩兰烷 茺蓂烷 胡萝卜烷

(guaiane) (mexicanane) (vetivane) (zierane) (carotane)

桉柏烷 雪松烷 异缬草烷 香柠檬烷

(widdrane) (himachalane) (iso-valerane) (bergamotane)

β -檀香烷 丁香烷(石竹烷) 菖蒲烷 花侧柏烷

(β -santalane) (caryophyllane) (acorane) (cuparane)

环牻牛儿烷(环杏马烷) 勃勒烷 阿里亚烷 维鲁烷

(cyclogermacrane) (porledane) (alliacane) (verucalane)

念珠藤烷 海绵烷

(aplysane) (pallescentane)

(4) 三环型:

櫻草花烷 胡椒烷(玷吧烷; 桉兰烷) 橄榄烷 马兜铃烷
(hirsutane) (copane, aglaiane) (maliane) (aristolane)
伊鲁烷 罗汉柏烷 芳萜烷 柏木烷 蒲尔旁烷
(illudane) (thujopsane) (aromadendrane) (cedrane) (bourbonane)
藜香烷 异藜香烷 三环岩兰烷 吉马松烷
(patchulane) (iso-patchulane) (tricyclovetivane) (germazane)
长叶松节烷(长叶蒎烷) 卡普烷 α -檀香烷 异柯母烷
(longipinane) (capnellane) (α -santalane) (iso-comane)
跨转烷 长叶烷 别丁香烷 异别丁香烷 非洲烷
(quadrane) (longifolane) (clovane) (iso-clovane) (africanane)

(5) 四环型:

长叶环烷 索拉烷
(longicyclane) (solanascane)

(三)常见的二萜类环系:

(1) 无环型:

植物烷
(phytane)

(2) 单环型:

维 A 烷 富司烷 樟脑烷 烟草烷(西松烷)
(vitamane A) (fusane) (camphorane) (cembrane)

(3) 二环型:

半日花烷 软珊瑚烷 棕海藻烷 科仑烷
(labdane) (soft-corane) (glossophorane) (columbane)

克罗烷

(clerodane)

(4) 三环型:

塔三烷 桃柝烷 卡斯烷 松香烷 香茶菜烷
(taxane) (tolarane) (cassane) (abietane) (rabdosane)

翠勒维烷 右旋海松烷 树心烷
(trinervitane) (dextropimarane) (vinhaticane)

(5) 四环型:

贝壳松烷 扁枝烷 咖啡烷 白叶烷 赤霉烷
(kaurane) (phyllocladane) (cafestane) (beyerane) (gibbane)

阿替烷

(atisane)

(四)常见的三萜类环系:

(1) 无环型:

角鲨烷
(squalane)

(2) 三环型:

龙涎香烷 马拉巴烷
(ambreane) (malabaricane)

(3) 四环型:

原萜烷 葫芦苦素烷 大戟烷 达玛烷
(protostane) (cucurbitane) (euphane) (dammarane)

阿朴大戟烷 紫苑烷 甘遂烷 芒柄花烷 羊毛甾烷
(apoeuphane) (shionane) (triruculane) (onocerane) (lanostane)

(4) 五环型:

乔木萜烷 土当归烷(β -香树脂烷;齐墩果烷) α -香树脂烷
(arborane) (oleane, β -amyrene) (α -amyrene)

绵马烷 何帕烷 锯齿石松烷 乌苏烷 吉曼烷
(filicane) (hopane) (serratane) (ursane) (germanicane)

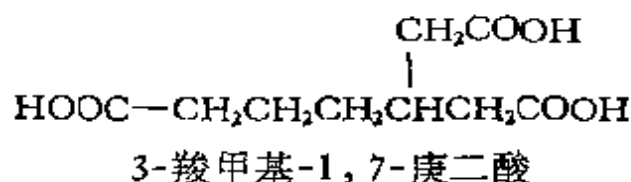
羽扇豆烷 木栓烷 蒲公英烷 谷汀烷 降香烷
(lupeane) (friedelane) (taraxastane) (glutinane) (bawerane)

8.5 有 机 酸

(一)脂肪酸(一元酸、二元酸、不饱和酸等)因其结构比较简单,一般按系统命名。但通用的俗名也可使用。

(1) 母体链的名称与烃类命名方法相同,只是以“酸”字作为词尾,编号方法见 2.13 节。

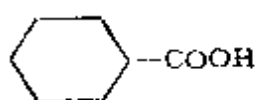
(2) 当羧基不直接接在母体链上时,该羧基则按取代基命名。



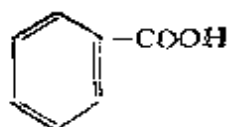
(3) 当羧酸分子具有几何异构或旋光异构等立体化学问题时,其命名原则见 6 章。

(二)在脂环酸、多元酸、芳香酸和杂环酸中,以羧酸作为母体命名。

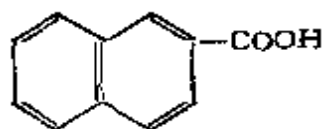
例:



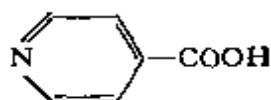
环己基甲酸



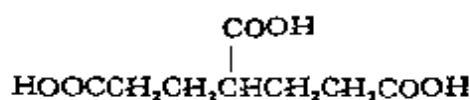
苯甲酸



2-萘甲酸



4-吡啶甲酸



1,3,5-戊烷三酸

(三)使用命名原则命名,其名称冗长的酸类可采用俗名。

(四)脂肪酸衍生物的命名方法见第 4 章。