

中国化学会
全国科学技术名词审定委员会
国家自然科学基金会

有机化合物命名原则修订

说明和意见征求

2012.10

IUPAC公布的有机化合物命名原则的文件 -- 1

INTERNATIONAL UNION OF PURE AND APPLIED CHEMISTRY
ORGANIC CHEMISTRY DIVISION
COMMISSION ON NOMENCLATURE OF ORGANIC CHEMISTRY

NOMENCLATURE OF ORGANIC CHEMISTRY

Sections A, B, C, D, E, F and H

1979 Edition

Prepared for publication by

J. RIGAUDY

Université Pierre et Marie Curie, Paris, France

and

S. P. KLESNEY

The Dow Chemical Company, Midland, Michigan, USA

全书559页



PERGAMON PRESS

有中译本664页—1987

OXFORD · NEW YORK · TORONTO · SYDNEY · PARIS · FRANKFURT

International Union of Pure and Applied Chemistry
Organic Chemistry Division
Commission on Nomenclature of Organic Chemistry (III.1)

A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds Recommendations 1993

(including revisions, published and hitherto unpublished, to the
1979 edition of *Nomenclature of Organic Chemistry*)

Prepared for publication by

R. PANICO, W. H. POWELL and

JEAN-CLAUDE RICHER (Senior Editor)

全书190页

OXFORD

BLACKWELL SCIENTIFIC PUBLICATIONS

LONDON EDINBURGH BOSTON

MELBOURNE PARIS BERLIN VIENNA

IUPAC公布的有机化合物命名原则的文件 -- 2

Pure Appl. Chem., Vol. 71, No. 3, pp. 531–558, 1999.
Printed in Great Britain.
© 1999 IUPAC

INTERNATIONAL UNION OF PURE AND APPLIED CHEMISTRY
ORGANIC CHEMISTRY DIVISION
COMMISSION ON NOMENCLATURE OF ORGANIC CHEMISTRY (III.1)
**EXTENSION AND REVISION OF THE
NOMENCLATURE FOR SPIRO COMPOUNDS**
(IUPAC Recommendations 1999)

Prepared for publication by
G. P. MOSS

Department of Chemistry, Queen Mary and Westfield College, Mile End Road, London, E1 4NS, UK

Pure & Appl. Chem., Vol. 70, No. 1, pp. 143–216, 1998.
Printed in Great Britain.
© 1998 IUPAC

INTERNATIONAL UNION OF PURE
AND APPLIED CHEMISTRY
ORGANIC CHEMISTRY DIVISION
COMMISSION ON NOMENCLATURE OF ORGANIC CHEMISTRY (III.1)
**NOMENCLATURE OF FUSED AND BRIDGED FUSED
RING SYSTEMS**
(IUPAC Recommendations 1998)

Prepared for publication by

G. P. MOSS

Department of Chemistry, Queen Mary and Westfield College, Mile End Road, London, E1 4NS, UK

- a, IUPAC Recommendations 1998: Nomenclature of **Fused and Bridged Fused Ring Systems**, *Pure Appl. Chem.* **1998**, 70, 143.
- b, IUPAC Recommendations 1999: Extension and Revision of the **von Baeyer System** for naming Polycyclic compounds (including Bicyclic Compounds), *Pure Appl. Chem.* **1999**, 71, 513.
- c, IUPAC Recommendations 1999: Extension and Revision of the Nomenclature for **Spiro Compounds**, *Pure Appl. Chem.* **1999**, 71, 531.
- d, IUPAC Recommendations 1998: **Phane Nomenclature, Part I: Phane Parent Names**, *Pure Appl. Chem.* **1998**, 70, 1513.
- e, **Corrections to A Guide** to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (IUPAC Recommendations 1993), *Pure Appl. Chem.* **1999**, 71, 1327.
- f, IUPAC Recommendations 1999: **Revised Section F: Natural Products and Related Compounds**, *Pure Appl. Chem.* **1999**, 71, 587.
- g, IUPAC Recommendations 2002: **Phane Nomenclature, Part II: Modification of the Degree of Hydrogenation and substitution Derivatives of Phane Parent Names**, *Pure Appl. Chem.* **2002**, 74, 809.



IUPAC发布的有机化合物命名原则的预览文件



International Union of Pure and Applied Chemistry

Nomenclature of Organic Chemistry

Chemical Nomenclature and Structure Representation Division

For nomenclature purposes, a structure containing at least one of the following elements is considered to

[provisional recommendations](#)

Chairman:

- [Favre, Henri](#)
- [Powell, Warren](#)

http://www.iupac.org/fileadmin/user_upload/publications/recommendations/Content

Contents

CHAPTER P-1 NOMENCLATURE OF ORGANIC COMPOUNDS [[pdf](#)]

P-10 Introduction

P-11 Scope of nomenclature of organic compounds

P-12 Preferred, preselected and retained names

P-13 Operations in nomenclature

P-14 General rules

P-15 Types of nomenclature

P-16 Name writing

CHAPTER P-2 PARENT HYDRIDES

P-20 Introduction

2004年上网预览

预定为:

“Nomenclature of Organic Chemistry, 2005 edition”

较完整的版本，共分10章，1306页。

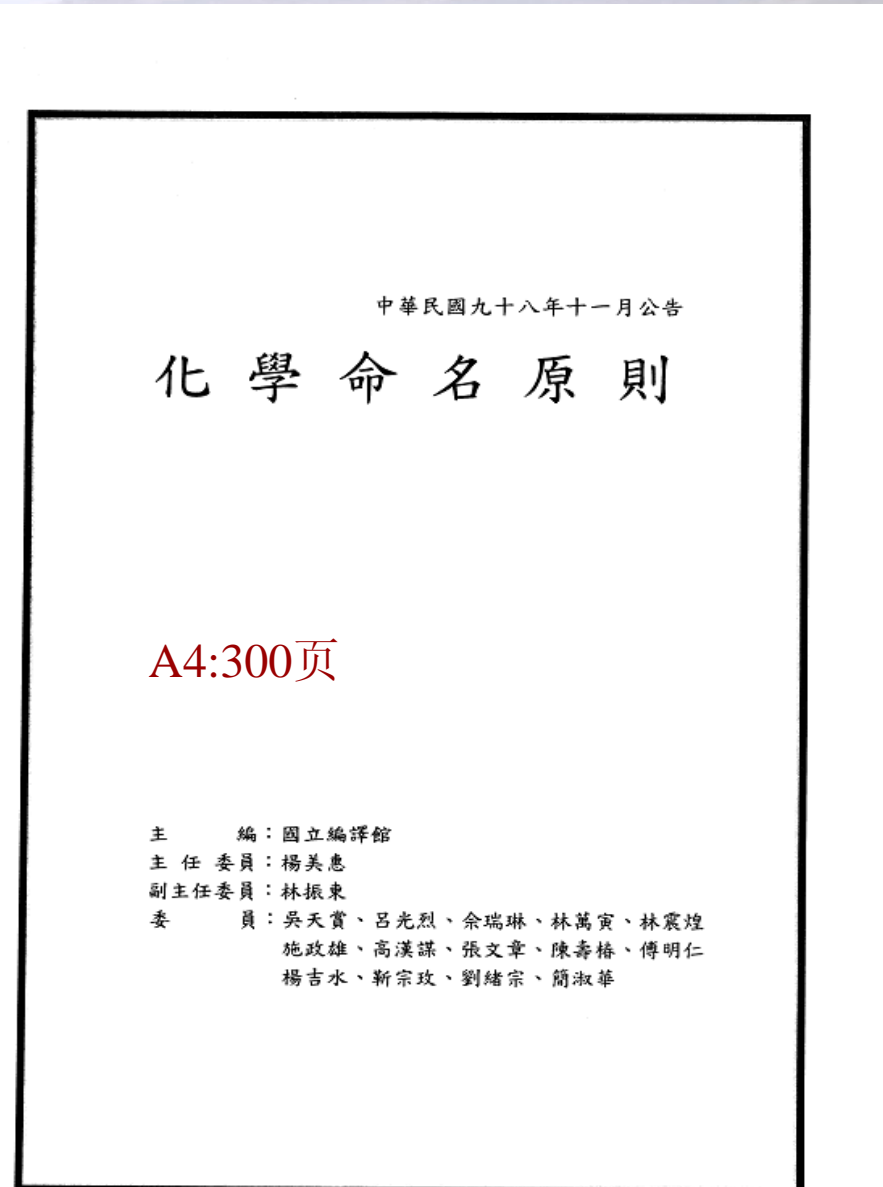
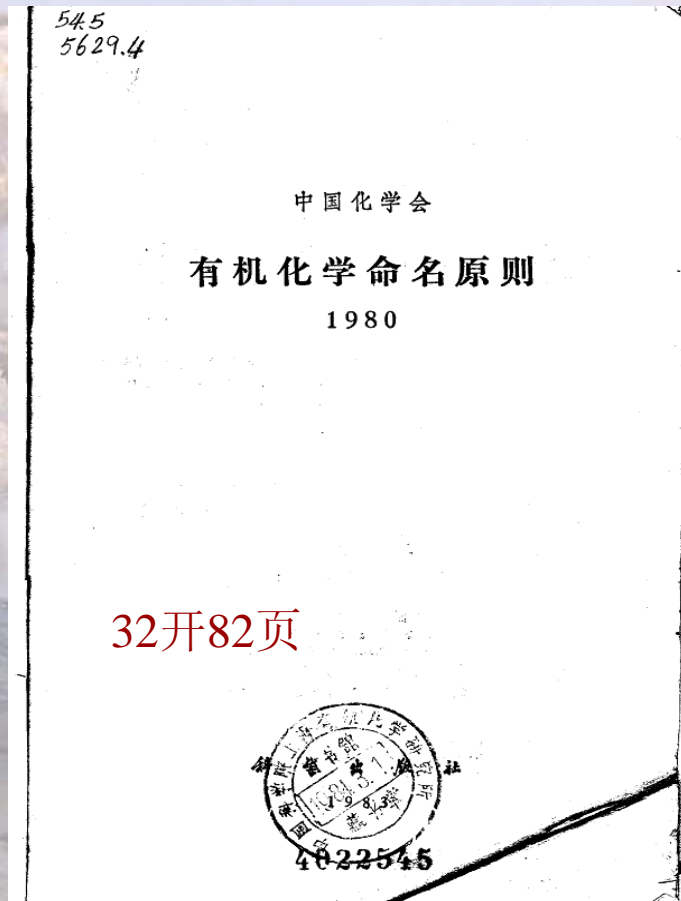
较新的提法:

‘preferred IUPAC nomenclature’ (PIN)

‘general’ IUPAC nomenclature

海峡对岸同行制定的化学命名原则 -2009-

我们制定的命名原则 -1980-



修订工作的基本思想

修订的原则是与当前国际命名规则一致，但是是中文的，符合中文构词的习惯。

修订后的命名规则能涵盖所有有机化合物的基本结构类型，但对一些罕见的结构类型则暂不收入。

在修订实施上拟以IUPAC 1993年出版的命名指南为母本，充实内容（包括一些新的建议, 2004修订预览）；在中文用字上参照中国化学会1980的规定，并作修订。

对若干结构类型如：并环，桥环，螺环，蕃等除将其命名要点编入正文外，再按IUPAC相应文件单独编译，拟分开或作为全书的附件发表。

有机化合物命名原则（大纲）

引言	3.7. 螺环（多环）母体氢化物
1. 有机化合物名称构词概要	3.8. 组合环和联环母体氢化物
1.1. 构词基本形式	3.9. 蕃 3.10. 天然产物母体氢化物
1.2. 中文化合物名称中的连缀字和前、后缀字	3.11. 由母体氢化物衍生的取代基命名
1.3. 有机化合物名称用数字和符号	4. 特性基团（官能(基)团）
1.4. 有机化合物名称构词中的基本术语	5. 命名实施导引
2. 有机化合物命名通则	6. 各类化合物的命名
2.1. 成键数	6.1. 卤素, 硝基, 亚硝基, 偶氮, 重氮, 叠氮化合物
2.2. 命名操作方法	6.2. 胺和亚胺
2.3. 氢的标明	6.3. 羟基化合物及其衍生物、类似物
3. 母体氢化物以及由此形成的取代基	6.4. 醛、酮及其衍生物、类似物
3.1. 有机化合物中的基元氢化物	6.5. 酸及其相关的特性基团
3.2. 无环多核氢化物	6.6. 金属有机化合物（包括14, 15, 16族元素）
3.3. 单环氢化物	6.7. 自由基和离子
3.4. 俗名和半系统命名的多环母体氢化物	7. 立体化学
3.5. 并（稠）环（多环）母体氢化物	8. 天然产物
3.6. 桥环（多环）母体氢化物	9. 同位素改变化合物

与1980版的相较中大的改动

烃(碳氢化合物) ——> 母体氢化物 (扩展至硅、硼、锆等)

官能(基)团 (Functional Groups)



特性基团 (Characteristic Groups)

取代基与母体以非碳—碳键相联者习惯上称作*特性基团* (或*官能(基)团*)，如-OH，=O，和-NH₂，但也并不尽然，这种例外如取代基-COOH，-CN。也许此时也可将具*官能性*的概念归纳为基团中存在有杂原子和/或不饱和度，但这定义也还是不十分精确。

(IUPAC) The functional group is an atom, or a group of atoms that has similar chemical properties whenever it occurs in different compounds.

修订说明

化学介词 (**1980版**) -- 构词学上的概念性错误



连缀字和前、后缀字

化学介词8个 (**1980版**) -- 化、代、合、聚、缩、并、杂、联

修订建议 (2012):

连缀字 -- 化、代(替)、合、缩、并、杂

前缀字 – 聚、联、脱(去、失、降)、增(高、加、扩、升)、环、断(开)、迁、逆

正、异、新、仲、叔、季

顺、反、(对)映

邻、间、对、迫

后缀字 – 基、亚基、爪基、自由基、根

较**1980版**明确了有机化合物名称种类:

1, 俗名; 2, 半俗名; 3, IUPAC系统命名名

不采用其它系统命名名, 如CAS, Beilstein 等命名

1, 成键数 (**Bonding number**) , 符号 λ^n 和 δ^c 的应用

2, 命名操作方法 (**Nomenclature operation**)

取代操作法 (**Substitutive operation**) ; 置换操作法 (**Replacement operation**) ; 加合操作法 (**Additive operation**) ; 缀合操作法 (**Conjunctive operation**) ; 减脱操作法 (**Subtractive operation**) ; 环开闭操作法 (**Ring formation or cleavage**) ; 重排操作法 (**Rearrangement**) ; 复合操作法 (**Multiplicative operation**)

3, 额外氢的标明 (**Indicated hydrogen**)

修订说明

第3章 母体氢化物以及由此形成的取代基

3.1. 有机化合物中的基元氢化物

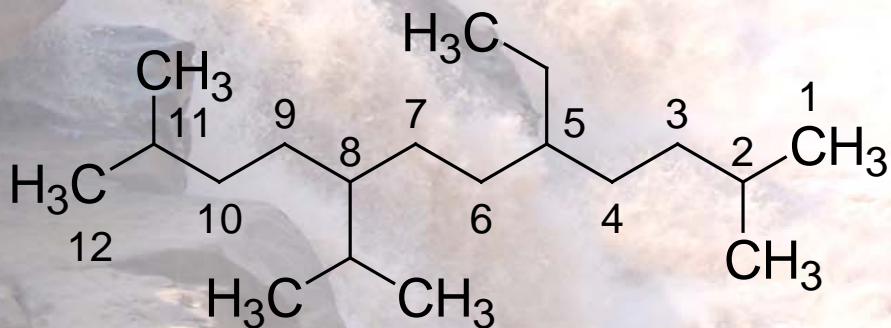
3.2. 无环多核氢化物

取代基在命名中的先后排列问题

1980年版：各支链取代基名称按其立体化学顺序规则（参见第7章）中的大小，自小至大在前缀中依次排列。

IUPAC英文命名中规定：按英文字母顺序在前缀中依次排列。

修订建议：还是与IUPAC规定一致。



2,11-二甲基-5-乙基-8-异丙基十二烷 (1980版)
(5-Ethyl-8-isopropyl-2,11-dimethyldodecane)

修订意见 **5-乙基-8-异丙基-2,11-二甲基十二烷**

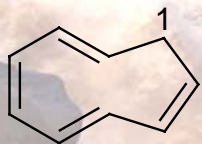
修订说明

第3章 母体氢化物以及由此形成的取代基

3.3. 单环氢化物

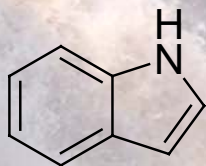
轮烯 (Annulene) 与满烯(环)体系 (Mancu(ni)de-ring system)

轮烯: 含最大非累积双键数的单环不饱和烃

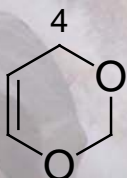


1H-[9]轮烯 (1H-[9]Annulene)

满烯(环)体系: 含最大非累积双键数的环



吲哚 (Indole)



4H-1,3-二氧己环 (4H-1,3-Dioxine)

3.3. 单环氢化物

Hantzsch-Widman (汉栖—魏德曼) 杂环命名系统

IUPAC 对含杂原子的3—10员单环化合物除有俗名外的命名系统；在(1980版)中文命名中仅五员的含氮杂环以及同时含有硫、氧的含氮杂环采用这一方式命名

环大小	英文不饱和后缀	中文不饱和后缀	英文饱和后缀	中文饱和后缀
3	irene (irine*)	不采用	irane (iridine*)	(丙啉*)
4	ete	不采用	etane (etidine*)	不采用
5A	ole	唑	olidine (oline**)	唑烷 (唑啉**)
5B	ole	不采用	olane	不采用
6A	ine	不采用	ane	噁烷***
6B	ine	不采用	inane	不采用
6C	inine	不采用	inane	不采用
7	epine	不采用	epane	不采用
8	ocine	不采用	ocane	不采用
9	onine	不采用	onane	不采用
10	ecine	不采用	ecane	不采用

* 杂原子=N; ** 半饱和; *** 杂原子=O

修订建议 另一方案

环大小	英文不饱和后缀	中文不饱和后缀	英文饱和后缀	中文饱和后缀
3	irene (irine*)	丙环	irane (iridine*)	丙环烷 (丙啶*)
4	ete	丁环	etane (etidine*)	丁环烷
5A	ole	戊环 (唑)	olidine (oline**)	戊环烷 (唑烷 (唑啉**))
5B	ole	戊环	olane	
6A	ine	己环	ane	己环烷 (噁烷 ***)
6B	ine	己环 (嗪*)	inane	己环烷
6C	inine	己环	inane	己环烷
7	epine	庚环	epane	庚环烷
8	ocine	辛环	ocane	辛环烷
9	onine	壬环	onane	壬环烷
10	ecine	癸环	ecane	癸环烷

按满环环系处理：称丙、丁、戊、己、辛、壬、癸环

或用大写数字：叁、肆、伍、陆、柒、捌、玖、拾环

前缀的翻译

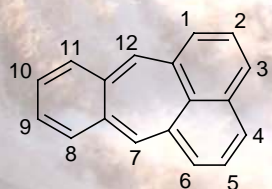
元素	成键数	英文前缀	中文前缀	元素	成键数	英文前缀	中文前缀
F	1	Fluora	氟杂	As	3	Arsa	砷杂
Cl	1	Chlora	氯杂	Sb	3	Stiba	锑杂
Br	1	Broma	溴杂	Bi	3	Bisma	铋杂
I	1	Ioda	碘杂	Si	4	Sila	硅杂
O	2	Oxa	氧杂, 噁	Ge	4	Germa	锗杂
S	2	Thia	硫杂, 噻	Sn	4	Stanna	锡杂
Se	2	Selena	硒杂	Pb	4	Plumba	铅杂
Te	2	Tellura	碲杂	B	3	Bora	硼杂
N	3	Aza	氮杂	Hg	2	Mercura	汞杂
P	3	Phospha	磷杂				

修订说明

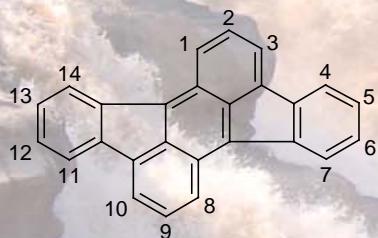
第3章 母体氢化物以及由此形成的取代基

3.4. 俗名和半系统命名的多环母体氢化物

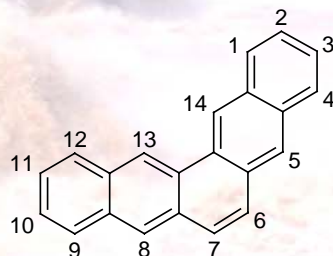
新定了几个中文俗名（尽量不简单的音译） 如：



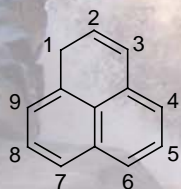
昴(mao)苯（昴星团内有七棵亮星）
Pleiadene（Pleiades-昴星团）



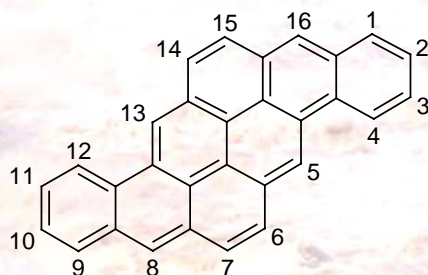
荭(hong)
Rubicene



五芬
Pentaphene



菖(ju)
Phenalene



锥苯
Pyranthrene

修订说明

第3章 母体氢化物以及由此形成的取代基

3.5. 并（稠）环（多环）母体氢化物（修订建议：不用‘稠’字）

3.6. 桥环（多环）母体氢化物

3.7. 螺环（多环）母体氢化物

3.8. 组合环（Ring assemblies）和联环（Ring assemblies）母体氢化物

3.9. 蕃（phanes）（修订建议：新增的一类母体氢化物名）

3.10. 天然产物母体氢化物

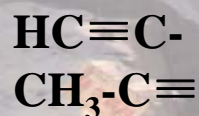
这几部份内容增加很多，计划除将其命名要点编入正文外，再按IUPAC相应文件单独编译，作为全书的附件。

Phane → 番（fan） → 蕃（仍发音fan，不读bo）

第3章 母体氢化物以及由此形成的取代基

3.11. 由母体氢化物衍生的取代基命名

游离价键数	1980版	修订建议中文后缀	英文后缀	示意	注
单价	基	基	-yl	[C]-	
二价	亚基	叉基	-diyl	-[C]-	
	亚基	亚基	-ylidene	[C]=	指双键
三价	次基	爪基	-triyl	-[C]<	
	炔	次基	-ylidyne	[C]≡	指叁键
	亚基基	基亚基	-ylylidene	-[C]=	
四价		肆基	-tetrayl	>[C]<	
		基次基	-ylylidyne	-[C]≡	
		双亚基	-diylidene	=[C]=	
		叉基亚基	-diylylidene	>[C]=	



乙炔基
乙炔基

乙炔基
乙次基

大连理工大学90岁曹忠民教授关于基的建议

游离价键数	中文后缀	英文后缀	示意	曹先生后缀
单价	基	-yl	[C]-	基
二价	叉基	-diyl	-[C]-	二基
	亚基	-ylidene	[C]=	丩基
三价	爪基	-triyl	-[C]<	三基
	次基	-ylidyne	[C]≡	川基
	基亚基	-ylylidene	-[C]=	基 丩基
四价	肆基	-tetrayl	>[C]<	
	基次基	-ylylidyne	-[C]≡	
	双亚基	-diylidene	=[C]=	
	叉基亚基	-diylylidene	>[C]=	

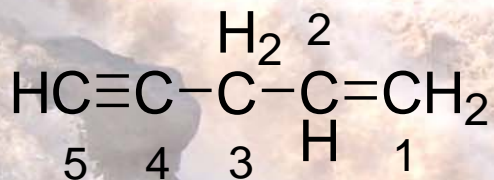
修订说明

第4章 特性基团（官能(基)团）

4.1. 不饱和基团

（1980年中国化学会有机化学命名原则中将重键的位次编号置于母体名称之前，而第二种重键的位次编号置于后缀烯、炔前。修订建议则按IUPAC新规一律置于相应的烯、炔前。）

例： 戊-1-烯-4-炔 （Pent-1-en-4-yne）原(1980)： 1-戊烯-4-炔



修订说明

第4章 特性基团（官能(基)团）

4.2. 特性基团

特性基团在取代命名时作为前缀或后缀的用字，较**1980版**有较多补充，其中需讨论的几条：

结构类别	结构式 ^[1]	作前缀时名称	作后缀时名称
醇，酚 (Alcohols, Phenols)	-OH	羟基- (hydroxy-)	醇，酚 (-ol)
醛 (Aldehydes)	-CHO -(C)HO	甲酰基- (formyl-) 氧亚基- (oxo-)	-甲醛 (-carbaldehyde) -醛 (-al)
羧酸 (Carboxylic acid)	-COOH -(C)OOH	(羧) 羧基- (carboxy-) —	-甲酸 (- carboxylic acid) -酸 (-oic acid)
酮 (Ketones)	>(C)=O	氧亚基- (oxo-)	-酮 (-one)

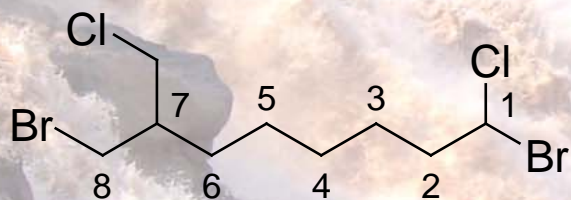
也还是取代基在命名中的先后排列问题

1980年版：各支链取代基名称按其立体化学顺序规则（参见第7章）中的大小，自小至大在前缀中依次排列。

IUPAC英文命名中规定：按英文字母顺序在前缀中依次排列。

修订建议：还是与IUPAC规定一致。

还与编号方式有关



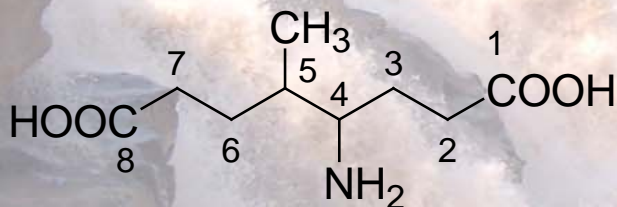
1,8-Dibromo-1-chloro-7-(chloromethyl)octane

1,8-二溴-1-氯-7-(氯甲基)辛烷

1980年版： 7-(氯甲基)-1-氯- 1,8-二溴辛烷

1980年版还应改成

2-(氯甲基)-8-氯- 1,8-二溴辛烷



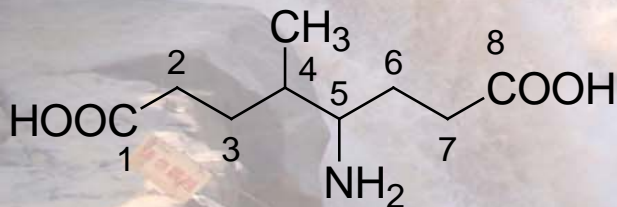
4-Amino-5-methyloctanedioic acid

4-氨基-5-甲基辛二酸

1980年版： 5-甲基-4-氨基辛二酸

1980年版还应改成

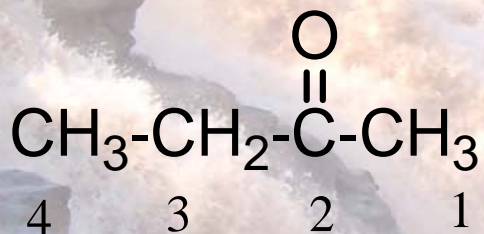
4-甲基-5-氨基辛二酸



中文‘酮’命名中的困惑

取代法命名时英文用后缀‘-one’，中文用‘酮’（此酮不含碳原子）

官能团类别法命名时英文用类别名‘ketone’，中文也用‘酮’（此酮含碳原子，表示>C=O）



丁-2-酮 (butan-2-one) (PIN)

乙基甲基酮 (ethyl methyl ketone)

Ketone 称‘甲酮’？

- 7.1. 导言 对立体化学术语作了简明扼要的介绍，如手性，立体异构源因素（**stereogenic unit, stereogen, stereoelements**）
- 7.2. 立体化学中三维结构的构型图像表达方式
- 7.3. 手性化合物的构型表示法
- 7.4. 双键类异构体表达
- 7.5. 环状化合物异构体表达

变丰化合物 (1980版)



同位素丰度改变化合物 (Isotopically modified compounds)

有待和正在进行的工作

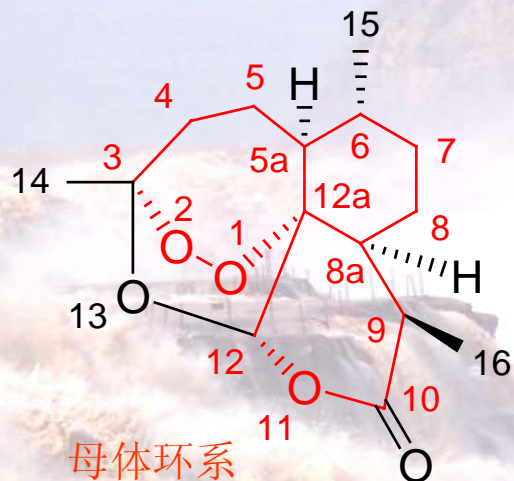
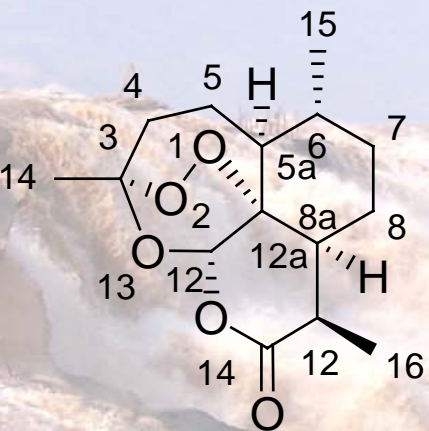
第8章 天然产物 (Natural Products) (仅撰写了甾体一节)

半系统命名，二种类型：

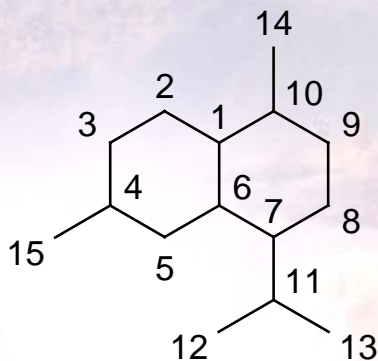
一，基于母体氢化物的天然产物命名：生物碱，萜类，甾体，黄酮等

二，基于官能性母体的天然产物命名：氨基酸和多肽，核苷和核苷酸，糖，类脂化合物等

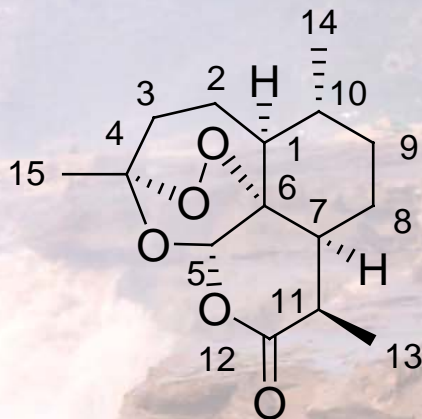
天然产物命名的复杂性 例：青蒿素（俗名）



母体环系



母体氢化物—杜松烷
(cadinane)



青蒿素 (qinghaosu,
artemisinin, arteannuin)

系统名 (3*R*,5*aS*,6*R*,8*aS*,9*R*,12*S*,12*aR*)-八氢-3,6,9-三甲基-3,12-氧桥-12*H*-吡喃并[4,3-*j*]-1,2-苯并二氧庚环-10(3*H*)-酮

((3*R*,5*aS*,6*R*,8*aS*,9*R*,12*S*,12*aR*)-octahydro- 3,6,9-trimethyl-3,12-epoxy-12*H*-pyrano[4,3-*j*]-1,2-benzodioxepin-10(3*H*)-one)

半系统名 (1*S*,4*R*,5*S*,6*R*,7*S*,10*R*,11*R*)-4,5-氧桥-4,6-过氧桥-4,5-断-杜松烷-12(5)-内酯
((1*S*,4*R*,5*S*,6*R*,7*S*,10*R*,11*R*)-4,5-epoxy-4,6-epidioxy-4,5-seco-cadinano-12(5)-lactone)

问题

(一) 大原则

与当前国际命名规则一致, 仅是从拼音字母构成的词改成方块字构成的词。

不造新的汉字, 需要时尽量意译, 慎用音译。

简明还是详细

拟以IUPAC 1993年出版的命名指南为母本, 再充实内容, 估计最后约30万字 (约1980版的4倍)。

是否另出一本简明版供基础教学用?

问题

(二) 撰写中的大问题

(1) 基的问题；

(2) **Hantzsch-Widman**的杂环命名；

(3) 命名中前缀（基团或环）的排列次序问题

按英文名称的字母（英文中采用）

按基团大小（中文**1980**版）

(4) 是否要区分

磷，麟，鏘；（**Phosphane**磷烷；**Phosphine**磷烷？）

砷，肿，鉍；

硫，毓；

等

问题

(三) 撰写中的小问题

- (1) 一些化合物名称音译与意译
- (2) 意译时的确切性问题，如：**achiral** 是无手性还是非手性
- (3) **Chalcogen**的译名指硫、硒、碲—硫属，氧族？



谢谢!

请提宝贵意见

征求意见稿 (pdf) 请见网页: <http://sioc-journal.cn> 中的‘有机化学’

<http://sioc-journal.cn>