

John A. Dean

Lange's Handbook of Chemistry

根据 McGraw-Hill, Inc. 1998 年第 15 版译出

---

John A. Dean

**Lange's Handbook of Chemistry, fifteenth edition**

ISBN: 0-07-016384-7

Copyright © 1999, 1992, 1985, 1979, 1973, 1967, 1961, 1956 by McGraw-Hill, Inc. All rights reserved.

Copyright renewed 1972 by Norbert Adolph Lange.

Copyright 1952, 1949, 1946, 1944, 1941, 1939, 1937, 1934 by McGraw-Hill, Inc. All rights reserved. Printed in the United States of America. Except as permitted under the United States Copyright Act of 1976, no part of this publication may be reproduced or distributed in any form or by any means, or stored in a data base or retrieval system, without the prior written permission of the publisher.

Simplified Chinese translation edition jointly published by Science Press and McGraw-Hill Education (Asia) Co.

本书中文简体字翻译版由科学出版社和美国麦格劳-希尔教育(亚洲)出版公司合作出版。未经出版者预先书面许可,不得以任何方式复制或抄袭本书的任何部分。

本书封面贴有 McGraw-Hill 公司防伪标签,无标签者不得销售。

北京市版权局著作权合同登记号:01-2000-2225

---

# 兰氏化学手册

(第二版)

[美] J. A. 迪安 主编

魏俊发 等 译

科学出版社

北京

图字:01—2000—2225

## 内 容 简 介

本书是一部资料齐全、数据翔实、使用方便、供化学及相关科学工作者使用的单卷式化学数据手册,是两代作者花费了半个多世纪的心血搜集、编纂而成的,在国际上享有盛誉,自1934年第1版问世以来,一直受到各国化学工作者的重视和欢迎。

本书第1至第10版由N. A. 兰格(Lange)先生主持编纂,原名《化学手册》。兰格先生逝世后,从第11版开始由J. A. 迪安(Dean)任主编,并更为现名,以纪念兰格先生。中译本根据原书1998年第15版译出,共分11部分,内容包括有机化合物,通用数据,换算表和数学,无机化合物,原子、自由基和键的性质,物理性质,热力学性质,光谱学,电解质、电动势和化学平衡,物理化学关系,聚合物、橡胶、脂肪、油和蜡及实用实验室资料等。

本书所列数据和命名原则均取自国际纯粹化学与应用化学联合会最新数据和规定。化合物中文名称按中国化学会1980年命名原则命名。

本书是从从事化学、物理、生物、矿物、医药、石油、化工、材料、工程、能源、地质、环保、专利、管理等方面工作的科技人员、生产人员、大专院校师生和各类图书馆必备的工具书。

### 图书在版编目(CIP)数据

兰氏化学手册/(美)迪安(J. A. Dean)主编;魏俊发等译.—2版.—北京:科学出版社,2003

Lange's Handbook of Chemistry

ISBN 7-03-010409-9

I. 兰… II. ①迪…②魏… III. 化学-手册 IV. O6-62

中国版本图书馆CIP数据核字(2002)第032969号

责任编辑:黄海 王志欣/责任校对:柏连海

责任印制:安春生/封面设计:陈敬

科学出版社发行 各地新华书店经销

\*

2003年5月第 一 版 开本:787×1092 1/16

2003年5月第一次印刷 印张:99

印数:1—3 000 字数:3 300 000

定价:188.00元

(如有印装质量问题,我社负责调换(新欣))

## 译者序

案头有一部资料齐全、数据翔实、使用方便、篇幅不大、具有权威性的化学数据手册，想必是化学工作者以及与化学有关的科学工作者的一个共同愿望。《兰氏化学手册》正是这样一部在国际上享有盛誉的权威性化学工具书。即便是在当今网络资信发达的时代，它依然具有节省大量查阅资料的时间的价值。因此，当科学出版社提议翻译这部手册的第 15 版时，我们几位年轻的化学工作者不揣才疏学浅，欣然领受了这一任务。

《兰氏化学手册》，原名《化学手册》，是由已故 N. A. Lange(兰格)先生主持编纂的。自 1934 年第 1 版问世，到兰格先生逝世时，已再版至第 10 版。从第 11 版开始由 J. A. Dean(迪安)接任主编，并更为现名，以纪念兰格先生。目前本书已再版至第 15 版。经两代编者、60 多年、15 版次的修订、补充和更新，这部单卷式化学手册以其内容丰富、项目齐全、数据可靠、查阅方便，受到各国化学工作者的普遍欢迎，成为从事化学、物理、生物、矿物、医药、食品、石油、化工、材料、工程、能源、地质、环保、专利、管理等各方面工作的科技人员、生产人员、大专院校师生和各类图书馆必备的工具书。

10 年前，科学出版社曾主持翻译过原书的第 13 版(尚久方等译，1991,3)。即将出版的中译本是根据原书的最新版本——1998 年第 15 版翻译的。在经历了第 14 版的重大改编之后，新版无论是在选材方面、还是在题材组织方面都有较大变化，许多表格中的条目数量也有很大变化，增加了许多新的条目，删除了一些陈旧的和常用的条目。另外，采用了新的国际原子量表和新的国际温标 ITS-90，许多数据也发生了变化(参见原书第 15 版、14 版序言)。

第 15 版中译本共分 11 部分，内容包括：“有机化合物”，“通用数据、换算表和数学”，“无机化合物”，“原子、自由基和键的性质”，“物理性质”，“热力学性质”，“光谱学”，“电解质、电动势和化学平衡”，“物理化学关系”，“聚合物、橡胶、脂肪、油和蜡”及“实用实验室资料”等。书中各部分内容的详细介绍，编者已在第 15 版、14 版及 1 版序言中述及(也可以在各部分前的细目中查找)，这里不再赘述。

中译本的第 1 部分中“有机化合物命名法”和第 3 部分中“无机化合物命名法”是按国际纯粹化学和应用化学联合会(IUPAC)制订的英文命名法直译的，与中国化学会 1980 年命名原则有所不同，请读者使用时注意。考虑到国内读者参与国际交流，如发表英文论文等愈来愈多，翻译时均在有关名词后用括号注明其英文单词或词缀，以利于读者运用英文命名法命名所需化合物。

中译本中有机化合物和无机化合物的中文名称则是按中国化学会 1980 年命名原则[参见中国化学会《有机化合物命名原则》(1980)和《无机化合物命名原则》(1980)或《英汉化学化工词汇》(第 4 版)的附录，科学出版社，2002]命名的。俗名和惯用名一般均取自《英汉化学化工词汇》。

为了便于读者查阅，中译本中许多表格的条目顺序已按汉语拼音顺序重新排列，读者可以借用查字典的方法查找所需条目。注意，条目名称中的阿拉伯数字、希腊字母、英文

字母等不纳入排序。有的表格内容丰富,篇幅庞大,重新排序可能导致混乱,如第 1 部分表 1.15“有机化合物的性质”,则另外编制了一个中文名称索引。

原书中的明显错误包括印刷错误,中译本已作了更正,并用译者注加以说明。难以确认或难以更正的错误,以“疑有误”的形式存疑,并加注说明。另有极个别化合物的名称,主要是俗名、同义名或矿物名,现有词典、资料上难以找到,则用英文原名表示。

全书由魏俊发教授主译、审校和最终统稿。参加翻译的人员(按章节顺序排列)有:魏俊发教授(序言、第 1、2、5、6、7、8、9、10、11 部分)、张安运博士(第 2、6 部分)、杨祖培博士(第 3、4 部分)、高子伟博士(第 5 部分)、杨义芳博士(第 8、9 部分)、胡道道博士(第 11 部分、索引)。

本书的翻译工作历时 2 年完成。像原书编者一样,译者也是殚精竭虑、反复推敲,力求做到既翻译准确、术语规范、语言流畅,又保持原文风格和特色。对于那些条目顺序作了重新排列的表格,力求做到数据誊录准确无误,并已作了反复核对。尽管如此,或因水平所限,或因百密一疏,错误、欠妥和疏漏之处一定是难免的,甚至为数不少。衷心希望并感谢读者——无论是化学或其他领域内的前辈、同人,还是学生——指正译本中的这些错误、欠妥和疏漏之处,以便在今后重印时加以改正。来函可寄至科学出版社,也可以直接寄与译者,或通过 E-mail([weijf@snnu.edu.cn](mailto:weijf@snnu.edu.cn))联系。

魏俊发

2001.11

## 第 15 版序

本次新版为现任编者主持编纂的第 5 版,它依然是一部数据确凿、资料翔实的单卷式手册,是化学工作者——无论是专业人员还是学生——查阅资料时的首选工具书。编写本书的目的是为所有化学工作者提供充足的数据以满足其一般需要,而无须四处搜寻其他资料。读者将会发现本手册有节省查阅时间的价值,因为书中有许多数据表就是专门为此编纂的。

约有 4 300 种基本有机化合物的各种性质汇编于第 1 部分中,其中新增的有 300 条。所有条目都是根据其名称按字母顺序排列的。每一种化合物的资料包括(如果有的话)名称、结构式、式量、Beilstein 参见(如果没有,则参见 Merch Index 第 12 版)、密度、折射率、熔点、沸点、闪点以及在水和各种常见有机溶剂中的溶解度(如已知的话,则引用几个数据)。结构式用线性式表达时太复杂或含混不清的,则集中放在该条目出现的双单页底部。惯用的俗名以及别名,也按照它们各自的字母顺序及其在表中给定的序号汇列于双单页底部。另一帮助读者查找所需条目的措施是书中的经验式索引。

第 2 部分“通用数据、换算表及数学”中通用换算参数彻底进行了重新编纂。类似地,有关化学分析中的统计学内容新增了一倍多。

基本无机化合物的性质汇编于第 3 部分中,其条目数量略有增多。“溶解度”一栏中有许多条目为读者提供了相应化合物在所述溶剂中和给定温度下的准确溶解度数据。

第 4 部分“原子、自由基和键的性质”中,部分内容有了显著增加。譬如,在“分子和自由基的电离能”一表中,条目现增至 740 条,并新增了“离子生成焓”一栏。同样,“元素、分子和自由基的电子亲和势”表现增至 225 条。“核素”表中增列了放射性同位素、它们的放射性和中子俘获截面等内容。

第 5 部分中,重新修订了有机化合物的表面张力、黏度、介电常数和偶极矩。为了收进更多的不同温度下的数据,这部分内容分二个不同的表列出。有关表面张力、黏度的内容汇列于前一个表中,共有 715 条。其中还包含了液相温度范围。介电常数和偶极矩方面的内容列于另一表中,共计 1 220 条。这些在两个或多个温度下的数据使读者能够进行中间温度下的内插和极限外推。“空气中易燃混合物的性质”得到重新修订并增至 450 个化合物以上。闪点可在第 1 部分中查找。彻底修订了有关气体、液体和固体的热导率。气体的范德瓦尔斯参数采用了最新数据,并增至 500 种物质以上。

第 6 部分涉及“有机化合物和无机化合物的生成热、吉布斯生成能、熵和热容”及“熔化热、蒸发热、升华热和不同的温度下的比热容”,新增的内容有 11 页之多,但增加的主要是以前栏目中所没有的数据。有关临界温度、临界压力和临界体积方面亦收进了更多的内容。

光谱学部分予以保留,但作了少许修订和增补。本部分内容包括紫外-可见光谱、荧光光谱、红外和拉曼光谱以及 X 射线光谱。列出了火焰发射、火焰原子吸收、电热原子吸收、氩诱导偶合等离子体和火焰原子荧光光谱的各元素检出极限。核磁共振收录了元素的核性质、质子化学位移和偶合常数以及碳-13、硼-11、氮-15、氟-19、硅-29 和磷-31

的相应内容。

在第 8 部分中溶解度数据扩充了一倍,达 550 条之多。质子转移反应予以保留并作了修订,包括一些在不同温度下的质子转移反应、有机配体和无机配体金属配合物的形成常数、各种类型的缓冲溶液、参比电极、指示剂和电极电势。另外还修订了电导方面的内容,尤其是极限当量电导率表。

第 9 部分关于物理化学关系资料、第 10 部分关于聚合物、橡胶、脂肪、油和蜡的内容全部予以保留。

第 11 部分“实验室实用资料”进行了重大修改和扩增。增加了“分子沸点升高”表中条目数,改编和扩充了气相色谱固定相的 McReynolds 常量,新增加了离子交换树脂的选用指南和讨论,内容包括所有类型的柱填料和膜材料。更新了重量分析换算因子以反映几种元素的原子量变更。增添了“被通用分析试剂所沉淀的元素”一表和“可利用氧化还原当量测定的元素的公式”一表。关于沉淀滴定和络合滴定的讨论还包括了这两种分析技术的基准物质和指示剂。新增了掩蔽剂和解蔽剂主题,包括针对不同的元素、阴离子、中性分子的掩蔽剂和常见解蔽剂的讨论和表格。新增了一个汇列常见氨基酸连同它们的  $pI$ 、 $pK_a$  值以及它们的 3-字母和 1-字母缩写的表。最后,用一个长达 9 页的表汇列了气体和蒸气的阈限值(TLV)。

正如以前版次中的序言所述,编者已做了种种努力以选择最有用、最可靠的数据并准确地予以记载。然而,集 50 余年编纂教科书和手册的经验,编者深知仍会不可避免地出现一些莫名的差错。诚望读者一如既往,继续就今后版本中哪些内容应当增补、抑或应当删除提出建议,并继续指正书中存在的差错。来函请直接寄与编者,编者住址和电话将于 1999 年变更,但是 E-mail 地址仍然是“pd105@aol.com”。

J. A. 迪安

## 第 14 版序

本版是现任编者主持编纂的第 4 版。也许最简单的就是先谈谈此次新版中所没有变化的东西。它仍然是一部供化学工作者——无论是专业人员还是学生——查找资料时首选的单卷式数据手册。它的主旨是为所有化学工作者提供充足的数据,以满足其一般需要而无须四处查找资料。即使是那些拥有大型图书馆便利条件的化学工作者,也将会发现本手册有节省时间的价值,因为书中有许多数据表就是为此而专门编纂的。

然而,变化还是众多而且重大的。首先,在题材编排上就有变化,譬如,以前“分析化学”中的内容现在分成:光谱、电解质、电动势和化学平衡以及实用实验室数据等类目。聚合物、橡胶、脂肪、油和蜡则独立成一大部分。

约有 4 000 种基本有机化合物的性质汇编于第 1 部分中。在这些内容之前是有机化合物命名法则及立体化学简介。该命名法与国际纯粹化学与应用化学联合会(IUPAC)命名法委员会 1979 年制订的法则一致。表中所有条目均依其名称的前缀按字母顺序排列,每一种化合物的资料包括(如果有的话)名称、结构式、分子量、Beilstein 参见、密度、折射率、熔点、沸点、闪点以及在水和其他常见有机溶剂中的溶解度(如已知,则引用多个数据)。对于用线性式表达时太复杂或含糊不清的结构式,集中列在该条目中出现的那一页底部。惯用的俗名以及别名,则按各自的字母顺序和表中给定的序号汇列于每一页底部。另一有助于读者查找所需条目的措施是经验式索引。

第 2 部分将以前独成一章的“数学”与涉及“基本数据和换算表”的内容合并。基本物理常数选取 1986 年的推荐值。物理、化学中的符号与定义进行了全面修订和增补,条目分 14 类,并按照 IUPAC 1988 年发表的提议列出。缩写和标准字符,在某种意义上为前面的一些表格提供了一种字母顺序索引。换算因数表根据最新数值和 SI 单位进行了修正,一些过时的交叉条目和不常见条目予以删除。

大约有 1 400 种基本无机化合物的性质汇编在第 3 部分中。在此之前,扼要地介绍了根据 IUPAC 1990 年发表的提议而修订的无机化合物命名法。本部分中还列出了精确的原子量(或式量)值,并在括号中给出了最后一位数的误差,如果有的话。

在第 4 部分,键长与键的强度数据大大增加,不仅包含了元素的原子半径、有效离子半径和原子的共价半径,还包含了碳与其他元素之间、非碳元素相互之间的键长。所有长度数值均以皮米(pm 单位)给出。有效离子半径按离子电荷和配位数列出。键解离能以千焦每摩尔给出,并且,如果已知其最后一位或几位数的误差值,在括号中给出。新增的表包括键偶极矩、基团偶极矩、元素的功函以及元素的相对自然丰度。压缩了同位素表,只保留较常见的同位素,表中项目包括半衰期、自然丰度、热中子吸收截面和衰变放射性。条目内容得到更新。

第 5 部分中大幅增加了二元和三元共沸混合物表,使之达到 850 条之多。列出多达 975 种以上化合物的黏度、介电常数、偶极矩和表面张力数值。黏度和介电常数都尽可能给出两个温度下的值,以方便读者进行中间温度的插值或进行极限外推。偶极矩多以不



同物理状态下的值列出。表面张力在某一温度范围内可以用两个符合线性方程式的常数来计算。得到全面修订和增补的内容还有空气中易燃化合物的性质。另外新增加了一个关于三相点的表。

第 6 部分中收录了约 2 000 种有机化合物和 1 500 种无机化合物在 5 种不同温度下的生成热、吉布斯生成能、熵和热容,其中许多化合物还给出不止一个状态下的值。分别列出了有机化合物和无机化合物的熔化热、蒸发热、相变热和升华热。所有这些数据均以 SI 单位(焦耳)给出,并且均取自最新的资料诸如《JANAF 热化学数据表》(第 3 版, 1986)、《有机化合物的蒸发热》(1985)。得到更新的内容还有元素和化合物的临界性质。

光谱学部分增加了紫外-可见光谱、荧光光谱、拉曼光谱和质谱。而保留的内容都得到了彻底修订,特别是有关电子发射和原子吸收光谱、核磁共振和红外光谱的表格。光谱部分中还列出了火焰发射、火焰原子吸收、电热原子吸收、氩 ICP 和火焰原子荧光等分析技术中各元素的检出极限。核磁共振部分收录了元素的核性质、质子化学位移和偶合常数,以及碳-13、硼-11、氮-15、氟-19、硅-29、磷-31 的相应性质。

第 8 部分中将有关电解质、电动势和化学平衡的内容全部合并,而以前这些内容有一部分曾放在分析化学部分中。无机物和有机物的半波电势已得到彻底修订,元素及其化合物电势表则反映了 IUPAC 最新推荐值。

一个新的第 10 部分专门用于聚合物、橡胶、脂肪、油和蜡。在讨论了聚合物与橡胶之后,接着列出了塑料的化学式和一些重要性质。对每一类塑料都用表列出物理的、电气的、机械的和热力学的性能与特点。对各种类型的橡胶材料作了类似处理。还给出了橡胶和塑料的化学耐性和气体渗透性常数。本部分最后为脂肪、油和蜡的各种常数。

实用实验室资料安排在第 11 部分,是从过去版本的前几部分中抽出汇集而成的。在此基础上增补了分离方法、重量和容量分析以及实验室常用溶液等内容。有关分离方法的一些表是崭新的,包括色谱溶剂的性质、有相同折射率和有相同密度的溶剂、气相色谱固定相的 McReynolds 常量、精选的超临界液体的特性和各种操作条件下 HPLC 的典型操作手续。在重量分析和容量分析方面,重量分析因子、容量分析的方程式和当量、滴定分析因子连同 EDTA 金属络合物的生成常数一起被保留下来。在如今普遍重视化学品危险性的年代,本部分中增加了几个表,诸如一些常见的互相反应、不能相容的化学品、推荐冷藏于冰箱的化学品、长期低温贮存时发生聚合或分解的化学品。本部分还更新了美国标准筛的资料,修订了计温学数据使之与新国际温标—1990 相一致,并收进了 N-型热电偶的有关数据。

编者竭尽种种努力以选取最有用、最可靠的数据并准确无误地予以记载,但多年来编纂手册的经验令编者深知仍难免出现错误。诚望读者就今后再版时哪些内容应当增添、抑或应当删除提出建议,并指出书中错误。来信请直接寄到编者家中(打电话亦可)。

## 第 1 版序

本书是编者历经数年进行数据资料收集和编纂的结果,是供化学家使用的一部数据手册。书中选材力求满足这样一些化学工作者的需要,即他们不可能像专业研究人员那样有充裕的时间去查阅资料,或者他们周围缺乏大型图书馆可供利用。倘若本书所收录的资料能达到此种目的,编者将自感完成了一件有价值的事。即便是那些拥有综合性图书馆便利条件的专业人员,也将会发现本手册有节省查阅时间的价值,因为其中有许多数据表就是为此而专门计算的。

书中尽力选用最可靠的数据并准确地记载下来。但多年从事此项工作使编者深知难免会出现错误,即使为了克服这些错误已经付出了种种努力,要彻底杜绝也很困难。在这一点上,要感谢过去曾经指正错误的读者,同时感谢读者再次对此书中的错误予以指正,因为出版商已经承诺将不惜工本在以后的印次中加以必要的更正。

编者期冀通过合理利用版面,编纂一部资料齐全而篇幅有限的手册。这样就有一个困难常摆在编者面前,那就是必须决定哪些数据应当舍去,从而使手册不因篇幅过大而失于实用。编者不可能在化学科学的所有领域都有专家般的专门知识,也不可能所有情况下总能凭直觉就可以决定哪些特定的数值值得收载,尤其是在文献中就同一常数给出许多不同数值的情况下。如果某一特定领域内的专家在判断本书是否有用时,是根据本书中提供的、他所在专业以外的广泛数据而不是单单根据是否缺少那些只有他及他的同事感兴趣的、高度专业化的数据(这些数据他很熟悉,也根本不用从本书中查找),那么他对本书的评价是显而易见的。但是,如果这些专家能指出书中缺少他们所熟知的数据,并且认为其他专业性不强的人员也需要这些数据的话,再版时就可以根据他们的意见加以改进。

本书中尚有许多空白之处,盖因文献中缺乏这些数据使然。希望对化学领域中最重要的工作者之一,即教师而言,本书的价值不仅在于能够帮助他们解答那些对化学颇感兴趣的同学们提出的各种各样的问题,而且还在于能够通过书中的空白和前后不一之处获得启发,激励这些学生动手进行创造性实验工作,来弥补所缺数据。

虽然本书主要是为专业化学工作者和化学专业的学生编写的,但它也对许多没有受过化学专门训练的非专业人员有用。自然科学领域内的工作者——物理学家、矿物学家、生物学家、工程师、专利代理人和图书馆学家——都常常需要解决涉及化学品和建筑材料性质的有关问题,对此类需要,本书提供的资料是很有帮助的。并且,它不仅能够节省大量收藏专业书籍所需的费用,还能节省查找散见于各类文献中的资料所需的时间。正是为了这个缘故,编者特别精心地编制了一个综合索引,并为许多表编制了一些交叉参考。

---

希望本书对科学工作者来说就像词典对文献工作者那样有用,希望它的栖身之处是书案,而不是书架。

N. A. 兰格

1934 年 5 月 2 日

于俄亥俄州克里夫兰市

## 致 谢

衷心感谢那些为本书前些版次做过贡献,而且他们所编纂的内容在本版中被继续采用的人。特别感谢 L. P. Busetth 先生为本书第 13 版制订了换算因数表,并为本版制订了美国标准筛系列。

# 目 录

译者序

第 15 版序

第 14 版序

第 1 版序

致谢

第 1 部分	有机化合物 .....	( 1.1 )
第 2 部分	通用数据、换算表及数学 .....	( 2.1 )
第 3 部分	无机化合物 .....	( 3.1 )
第 4 部分	原子、自由基和键的性质 .....	( 4.1 )
第 5 部分	物理性质 .....	( 5.1 )
第 6 部分	热力学性质 .....	( 6.1 )
第 7 部分	光谱学 .....	( 7.1 )
第 8 部分	电解质、电动势和化学平衡 .....	( 8.1 )
第 9 部分	物理化学关系 .....	( 9.1 )
第 10 部分	聚合物, 橡胶, 脂肪, 油和蜡 .....	( 10.1 )
第 11 部分	实验室实用资料 .....	( 11.1 )

索引

# 第 1 部分 有机化合物

<b>1.1 有机化合物命名法</b> .....	<b>1.1</b>
1.1.1 无官能团的化合物 .....	1.2
表 1.1 直链烷烃的名称 .....	1.2
表 1.2 稠合多环烃 .....	1.6
表 1.3 杂环烃的特定命名 .....	1.10
表 1.4 杂环烃特定名称的词尾 .....	1.10
表 1.5 适用于稠环名称的杂环烃俗名 .....	1.11
表 1.6 不适用于稠环名称的杂环烃俗名 .....	1.13
1.1.2 官能团化合物 .....	1.15
表 1.7 取代命名中的特征基团 .....	1.15
表 1.8 在取代命名中只作为词头列出的特征基团 .....	1.17
表 1.9 根基官能团命名法中所用的官能团类名 .....	1.19
1.1.3 特征官能团的命名 .....	1.20
表 1.10 醇和酚的俗名及结构 .....	1.21
表 1.11 一些羧酸的名称 .....	1.26
表 1.12 含磷化合物的母体结构 .....	1.33
1.1.4 立体化学 .....	1.36
1.1.5 化学文摘(C.A.)索引系统 .....	1.44
表 1.13 有机基的名称和结构式 .....	1.44
<b>1.2 纯物质的物理性质</b> .....	<b>1.51</b>
表 1.14 有机化合物经验式索引 .....	1.51
表 1.15 有机化合物的物理常数 .....	1.74
有机化合物中文名称索引 .....	1.342

## 1.1 有机化合物命名法

下面对有机化合物命名法则的概述及其中所举的实例并不企求包罗所有的可能情况,更详尽的描述参见 J. Rigaudy 和 S. P. Klesney 编著的《有机化学命名》A、B、C、D、E、F、H 辑(*Nomenclature of Organic Chemistry*, Sections A, B, C, D, E, F, H, Pergamon Press, Oxford, 1979)。该书是在国际纯粹化学与应用化学联合会主持下完成的,其中有有机化学命名委员会推荐的术语。

## 1.1.1 无官能团的化合物

1.1.1.1 烷烃 饱和开链(非环)烃( $C_nH_{2n+2}$ )以“烷(-ane)”作为词尾来命名。前四个烃采用俗名甲烷(methane)、乙烷(ethane)、丙烷(propane)、丁烷(butane)。其余烷烃英文名称的前面部分来自希腊文词头(见表2.4),表示碳原子的数目,后接词尾“烷(-ane)”。如果词头中最后一个字母为“a”,则将“a”省去,如表1.1所示。

表 1.1 直链烷烃的名称

$n^{1)}$	名 称		$n$	名 称	
1	甲烷	methane	19	十九烷	nonadecane
2	乙烷	ethane	20	二十烷	icosane <sup>4)</sup>
3	丙烷	propane	21	二十一烷	heneicosane
4	丁烷	butane	22	二十二烷	docosane
5	戊烷	pentane	23	二十三烷	tricosane
6	己烷	hexane	30	三十烷	triacontane
7	庚烷	heptane	31	三十一烷	hentriacontane
8	辛烷	octane	32	三十二烷	dotriacontane
9	壬烷	nonane <sup>2)</sup>	40	四十烷	tetracontane
10	癸烷	decane	50	五十烷	pentacontane
11	十一烷	undecane <sup>3)</sup>	60	六十烷	hexacontane
12	十二烷	dodecane	70	七十烷	heptacontane
13	十三烷	tridecane	80	八十烷	octacontane
14	十四烷	tetradecane	90	九十烷	nonacontane
15	十五烷	pentadecane	100	一百烷	hectane
16	十六烷	hexadecane	110	一百十烷	decahectane
17	十七烷	heptadecane	120	一百二十烷	icosahectane
18	十八烷	octadecane	121	一百二十一烷	heneicosahectane

1)  $n$  = 碳原子总数。2) 以前称 enneane。3) 以前称 hendecane。4) 以前称 eicosane。

对支链化合物,以其中最长的连续链作为主链,把支链化合物视为主链上的氢被各种烷基取代而衍生出来的。名称前面的阿拉伯数字表示烷基所在碳的位次,编号应从主链两个链端中能使取代基位次最小的那一端开始。阿拉伯数字按数字顺序列出,数字与数字之间用逗号“,”分开,数字与名称的其他部分之间用连字符“-”分开。

如果作为侧链的同一烷基出现不止一次,则用二(di)、三(tri)、四(tetra)等表示。侧链名称依字母顺序(不包括倍数词头)列出,复基(侧链)的名称按全称从第一个字母开始考虑排列顺序。复基(侧链)的名称由相同的词构成时,优先列出的基团是在该基团上第一个不同接点上位次最小的基团。如果两个或两个以上侧链处于等同位置,那么命名中优先列出的那个侧链应给予最小位次。为了明晰起见,可以用加括弧的办法来完整地表示侧链,也可以用带撇的位次号来表示侧链碳原子。

如果几个等长的烃链都有可能选作母体,则按下列顺序依次选择:(1)含侧链数最多的链;(2)其侧链的位次为最小的链;(3)较小的侧链中含碳原子最多的链;(4)侧链支化最少的链。

以下几个俗名只限于未经取代的烃:

异丁烷 isobutane  $(CH_3)_2CHCH_3$

异戊烷 isopentane  $(CH_3)_2CHCH_2CH_3$

新戊烷 neopentane  $(\text{CH}_3)_4\text{C}$

异己烷 isohexane  $(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$

饱和直链烃末端碳原子上去掉一个氢所衍生的一价基,命名时以“基(-yl)”代替烷烃名称中的“烷(-ane)”即可。如乙烷(ethane)就变成乙基(ethyl)。

下列例外仅限于在未取代的情况下使用:

异丙基 (isopropyl)  $(\text{CH}_3)_2\text{CH}-$

异丁基 (isobutyl)  $(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2-$

仲丁基 (*sec*-butyl)  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)-$

叔丁基 (*tert*-butyl)  $(\text{CH}_3)_3\text{C}-$

异戊基 (isopentyl)  $(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{CH}_2-$

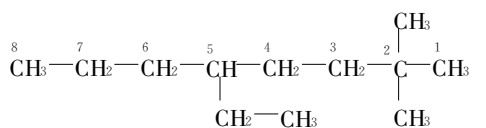
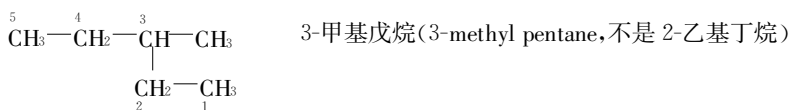
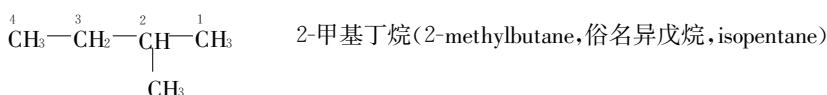
新戊基 (neopentyl)  $(\text{CH}_3)_3\text{CCCH}_2-$

叔戊基 (*tert*-pentyl)  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_2-$

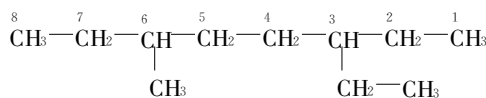
异己基 (isohexyl)  $(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{CH}_2-$

注意词头异(iso-),新(neo-),仲(*sec*-),叔(*tert*-)的用法,并注意外文何时使用斜体字。斜体词头不纳入字母顺序排列,除非是斜体词头相互之间进行比较。因而仲丁基(*sec*-butyl)列在异丁基(isobutyl)之前,异己基(isohexyl)在异丙基(isopropyl)之前,仲丁基(*sec*-butyl)在叔丁基(*tert*-butyl)之前。

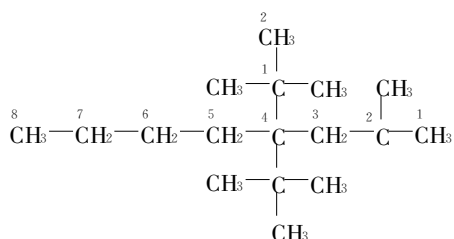
烷烃命名举例如下:



5-乙基-2,2-二甲基辛烷(5-ethyl-2,2-dimethyloctane, 注意位次号)



3-乙基-6-甲基辛烷(3-ethyl-6-methyloctane, 注意位次号的颠倒)



4,4-双(1,1-二甲基乙基)-2-甲基辛烷

[4,4-bis(1,1-dimethylethyl)-2-methyloctane]

4,4-双-1,1'-二甲基乙基-2-甲基辛烷

(4,4-bis-1,1'-dimethylethyl-2-methyloctane)

4,4-双(叔丁基)-2-甲基辛烷[4,4-bis(*tert*-butyl)-2-methyloctane]

饱和直链烷烃去掉两个氢原子形成的二价基可命名如下:(1)如果两个自由价键位于同一碳原子上,则用“亚基(-ylidene)”代替烃的词尾“烷(-ane)”。但对甲烷而言,用“亚甲基(methylene)”而不是“methylydene”。异亚丙基(isopropylidene)、仲亚丁基(*sec*-butylidene)和新亚戊基(neopentylidene)只适用于未取代的基。(2)如果两个自由价键位于不同碳原子上,则以端接于这两个碳原子间的直链基中所含亚甲基的数目来命名,其他基团均作为取代基予以命名。但该系列中的第一个是亚乙基(ethylene)而不是二亚甲基(dimethylene),亚丙基(propylene)指  $\text{CH}_3-\text{CH}-\text{CH}_2-$  [而三亚甲基(trimethylidene)指的是

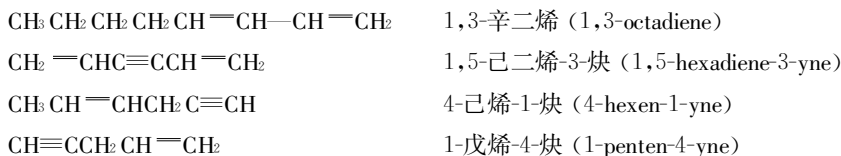


—CH<sub>2</sub>—CH<sub>2</sub>—CH<sub>2</sub>— ]。

同一碳原子上去掉三个氢原子得到的三价基,其命名是用“次基(-ylidene)”代替母体烃的词尾“烷(-ane)”。

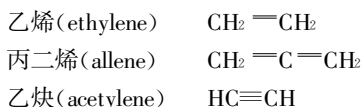
1.1.1.2 烯炔和炔烯 将词尾“烷(-ane)”改为“烯(-ene)”,便可将各饱和烃的名称变成相应的烯炔名称。对于炔烯,则是将词尾改为“炔(-yne)”。当有多个双键(或叁键)时,采用词尾“二烯(-adiene)”、“三烯(-atriene)”等。双键(或叁键)在主链上的位置用位次号加以注明,这个位次号是由最靠近双键(或叁键)的链端编号而得到的,譬如 CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>CH=CH<sub>2</sub> 为 1-丁烯, CH<sub>3</sub>C≡CCH<sub>3</sub> 为 2-丁炔。

含多个不饱和键的链,编号时应尽可能使不饱和键的位次最小。如编号有不同选择时,则双键应赋予最低位次,并在烯、炔同时存在的不饱和烃名称中优先列出。例如

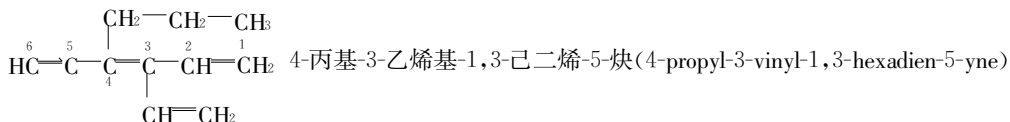


有支链的不饱和非环烃可以作为含双键和(或)叁键最多的链烃衍生物予以命名。如有不同选择时,选择主链的优先顺序为:(1)含碳原子数目最多的链;(2)含双键数目最多的链。

下面这些非系统名称予以保留:



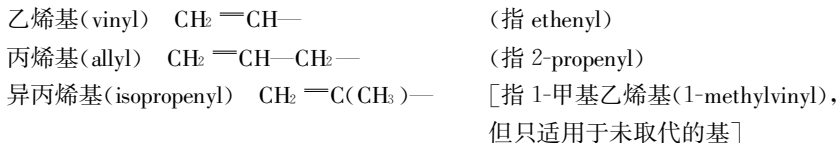
烯炔和炔烯命名的一个实例为:



烯炔和炔烯的一价基可用词尾“烯基(-enyl)”、“炔基(-ynyl)”、“二烯基(-dienyl)”、“二炔基(-diynyl)”等表示。必要时,用位次号注明双键和叁键的位置,并将带有自由价的碳原子编为“1”。例如



保留下列名称:



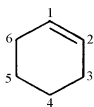
如果基的主链有不同选择时,则按以下的顺序选择:(1)双键和叁键数目最多的链;(2)碳原子数目最多的链;(3)双键数目最多的链。

从直链烯炔、双烯炔和炔烯的两个端碳原子上各去掉一个氢原子所得到的二价基,其命名是用词尾“亚烯基(-enylene)”、“二亚烯基(-dienylene)”和“亚炔基(-ynylene)”分别代替“烯(-ene)”、“二烯基(-diene)”和“炔(-yne)”。必要时,用数字注明双键和叁键的位置。亚乙烯基(-ethenylene)—CH=CH—的另一名称“vinylene”予以保留。

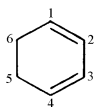
1.1.1.3 单环脂肪炔 单环脂肪炔(不带支链)的命名是将“环(cyclo-)”冠于相同碳数的开链炔名称之前。相应基的命名与烷、烯、炔基相仿。例如:



环己烷(cyclohexane) 环己基(cyclohexyl)(指基)



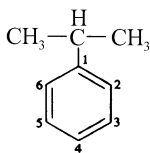
环己烯(cyclohexene) 1-环己烯基(cyclohexenyl)(指自由价位于1碳上的基)



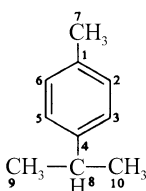
1,3-环己二烯(1,3-cyclohexadiene) 环己二烯基(cyclohexadienyl)(尽量给不饱和碳以较低位次,编号从带有自由价的碳原子上开始,并定为1)

为方便起见,脂肪环常用简单几何图形来表示:三角形代表环丙烷,正方形代表环丁烷,正五边形代表环戊烷,正六边形(如上图)代表环己烷,等等。可以理解,图形中每个角上有两个氢原子,除非指明有一个或两个其他基团。

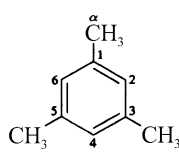
1.1.1.4 单环芳香化合物 除六个予以保留的名称外,所有的取代单环芳烃都作为苯的衍生物来进行系统命名。而且,如果这些有俗名的化合物中再引入一个与已有取代基相同的基团时,那么也要作为苯的衍生物来命名。六个保留的名称为:



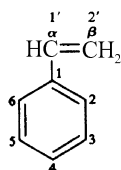
枯烯  
(cumene, 异丙基苯)



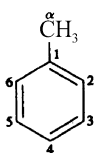
薹花烃(cymene, 甲基异丙基苯)  
(三种异构形式, 上为对位)



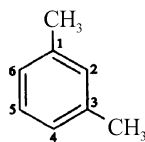
莱  
(mesitylene, 三甲基苯)



甲苯  
(tolene)



二甲苯  
(xylene)



苯乙烯(styrene)  
(三种异构型式, 此为间位)

取代基的位置用数字注明,其位次号要尽可能小。当名称是基于认可的俗名时,最小的位次应给予俗名蕴含的取代基。当苯环上有两个取代基时,它们的位置可以分别用“邻(*o*-, *ortho*-)、间(*m*-, *meta*-)、对(*p*-, *para*-)”代表“1,2-、1,3-、1,4-”。

由取代的单环芳烃衍生的、并且自由价(位次号为1)位于环原子上的基命名为苯基(phenyl)[以苯为母体,因为苯甲基(benzyl, 苄基)是指  $C_6H_5CH_2-$ ]、枯烯基(cumenyl)、莱基(mesityl)、甲苯基(tolyl)和二甲苯基(xyllyl)。所有其他的基都作为取代的苯基来命名。对于侧链上有单个自由价的基,下面的俗名予以保留:

苄基(benzyl)  $C_6H_5CH_2-$

二苯甲基(benzylhydril 或 diphenyl methyl)  $(C_6H_5)_2CH-$

三苯甲基(trityl)  $(C_6H_5)_3C-$

苯乙基(phenethyl)  $C_6H_5CH_2CH_2-$

苯乙烯基(styryl)  $C_6H_5CH=CH-$

肉桂基(cinnamyl)  $C_6H_5CH=CHCH_2-$

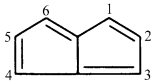
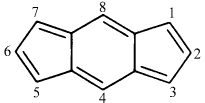
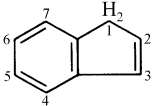
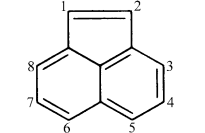
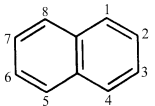
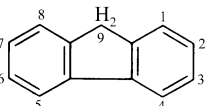
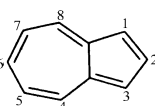
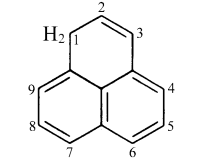
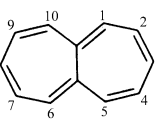
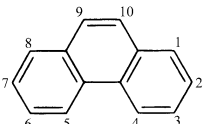
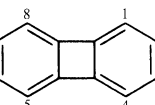
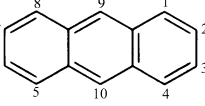
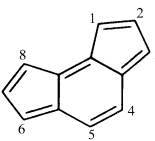
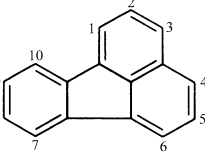
除此以外,侧链上带有自由价的基按烷、烯、炔的命名原则来命名。

对于  $-C_6H_4-$  基,保留亚苯基(phenylene)( $\sigma$ -,  $m$ -,  $p$ -)这一名称。由取代苯衍生的、并且自由价位于苯环上的双价基按取代的亚苯基予以命名,并将带有自由价的碳原子相应地编号为 1,2-、1,3-或 1,4-。

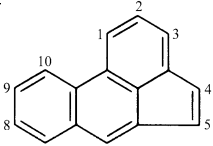
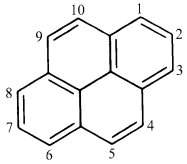
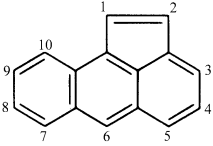
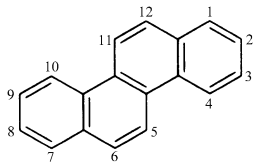
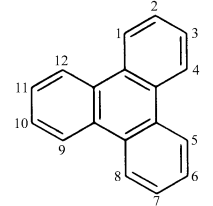
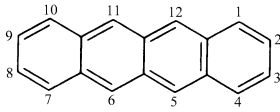
带有三个或多个自由价的基,其命名是在相应的烃的系统名称后加上词尾“三基(-triyyl)”、“四基(-tetrayl)”等。

1.1.1.5 稠合多环烃 含最大数目共轭双键的多环烃的名称以“-ene”结尾,此处的词尾并不表示一个双键。以横排式排列的含有五个或五个以上稠合苯环的烃,其命名是在数字词头之后缀以“省(-acene)”(表 2.4)。部分多环烃的名称汇列于表 1.2 中,其中许多名称是俗名。

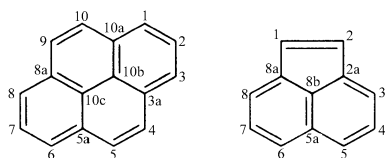
表 1.2 稠合多环烃(按选作母体化合物的优先顺序递增排列)

1. 并环戊二烯		8. 对称吡达省	
2. 茚(1H-茚)		9. 茚	
3. 萘		10. 芴	
4. 萸		11. 非那烯	
5. 庚间三烯并庚间三烯 (庚搭烯)		12. 菲	
6. 联亚苯		13. 蒽	
7. 不对称吡达省		14. 荧蒽	

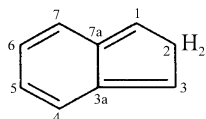
续表 1.2

15. 醋菲		18. 蒽	
16. 醋蒽		19. 衍	
17. 三亚苯		20. 并四苯	

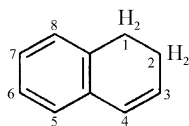
每一个环系都有固定的编号,如表 1.2 所示,但编号时遵循一种系统图式。各环系的位置画法应使(1)环系中最多数环处于横列水平,(2)将其余多数环置于横列水平右上象限。当有两种画法都能满足上述要求时,则选取其中左下象限环数最少的画法。编号从位于右上象限最大逆时针位置上的那个未参与稠合的碳原子开始,按顺时针方向进行,不考虑两个或多个环之间的共用原子。共用原子用其前一位置上碳原子的编号加一小写罗马字母来表示。环内共用原子取最大编号以顺时针方向加注小写罗马字母,不管是否有不同选择。蒽和菲属于这种编号原则的两个例外。环系编号举例如下:



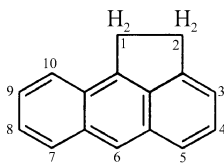
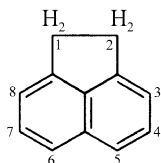
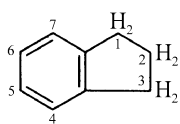
当一个具有最大共轭双键数目的环系能以两种或两种以上形式存在,而且其差异仅仅是“额外”氢原子的位置不同时,其命名可通过专门指明额外氢的位置来进行。其名称用位次号跟一个表示额外氢原子的斜体大写字母“*H*”加以限定。带有指示氢原子的碳原子给以尽可能小的编号。例如表 1.2 中描述的 1*H*-茚,而 2*H*-茚应为



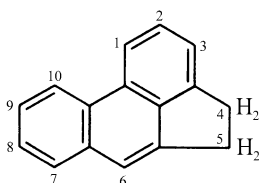
非累积双键数小于最大数目的多环烃,其名称是在相应的非还原烃的名称之前加上词头“二氢化(dihydro-)”、“四氢化(tetrahydro-)”等。词头“全氢化(perhydro-)”是指完全氢化。例如,1,2-二氢萘(1,2-dihydronaphthalene)是



保留使用的名称及其结构如下：



1,2-二氢茚 (indan) 二氢茈 (acenaphthene) 二氢醋蒽 (aceanthrene)



二氢醋菲 (acephenanthrene)

无认可俗名(见表 1.2)的多环化合物,如两个环之间有两个共用原子或者一个环上有两个原子与两个或多个相邻环共用,而且至少有两个五元或五元以上的环具有最大非累积双键数目,其命名是在母体环系名称或环系其他组分名称前加上词头。母体名称应当包含尽可能多的环(但要以有俗名为原则),并应当尽可能是表 1.2 中靠后列出的名称。此外,附加组分也应尽量简单。例如,可以写成二苯并菲(dibenzophenanthrene),而不写成萘并菲(naphthophenanthrene),因为附加组分苯并(benzo-)要比萘并(naphtho-)简单。表示附加组分的词头是将组分名称的词尾“-ene”改为“-eno-”,例如“茈并(indeno-)”来自“茈(indene)”。倍数词头按字母顺序排列。下面列出几种许用的缩写词头,相应的母体名称放在括号中:

茈并(acenaphtho-) (茈, acenaphthylene)

蒽并(anthra-) (蒽, anthracene)

苯并(benzo-) (苯, benzene)

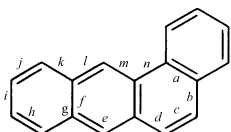
萘并(naphtho-) (萘, naphthene)

茈并(perlyo-) (茈, perylene)

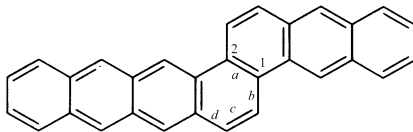
菲并(phenanthro-) (菲, phenanthrene)

对于苯并以外的单环芳并词头,许用下面名称,其中每一名称均代表其最大非累积双键数目形式:环戊二烯并(cyclopenta-)、芳庚并(cyclohepta-)、芳辛并(cycloocta-)等。

区别异构体的方法是将母体环的周边用小写字母逐一标记,标记时从字母 *a* 开始,表示 1,2 边,如



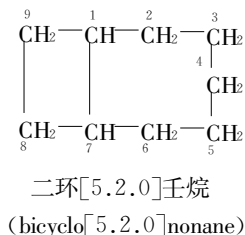
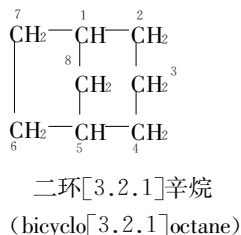
苯并 [*a*] 蒽  
(benz[*a*]anthracene)



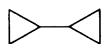
蒽并 [2,1-*a*] 并四苯  
(anthra[2,1-*a*]naphthalene)

此等等。如要更明确,则用数字(如 1,2) 注明取代环的连接位置,附加词头按字母顺序写出。数字和字母放在方括号内,并置于取代组分的名称之后。例如

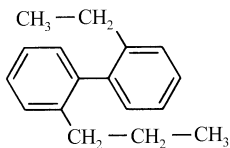
1.1.1.6 桥烃 由含有两个或两个以上共用原子的两个环组成的饱和脂环烃,采用碳原子总数相同的开链烃的名称,并在名称前冠以词头“二环(bicyclo-)”。环系编号时,从一个桥头开始,循最长的桥编到另一桥头,然后再循余下的次长桥编回到起始桥头,最后从紧挨着起始桥头的原子循最短桥完成全部编号。但编号有不同选择时,则给予不饱和键以最小编号。与桥头连接的每一个桥链上的碳原子数按递降顺序标示在方括号中。例如



1.1.1.7 联环烃 联环烃是两个或多个环系,或为单环系或为稠环系,通过双键或者单键直接相连的烃。对相同环系,命名时可以(1) 在相应的基的名称前加上词头“联(bi-)”,或者(2) 对通过一个单键相连的环系,在相应的烃的名称前加上词头“联(bi-)”。在上述两种情况下,联环烃的编号就是相应的基或烃的编号,一个环用不带撇的数字编号,另一个环用带撇的数字编号。名称前用适当的位次标明连接点,不带撇的编号视为低于带撇的相同编号。名称“联苯(biphenyl)”用于由两个苯环构成的联环烃。例如



1,1'-联环丙基或 1,1'-联环丙烷  
(1,1'-bicyclopropyl)或  
1,1'-bicyclopropane)



2-乙基 -1'-丙基联苯  
(2-ethyl-2'-propylbiphenyl)

对不同环系,命名时选择一个环系作为母体,而将其他环系看成取代基,并按字母顺序列出。母体环系采用不带撇的编号。选择母体时,依次考虑下列特征,直到作出决定:(1) 含环数较多的环系;(2) 含较大环的环系;(3) 氢化程度最低的环;(4) 表 1.2 中列出的序号最大的环系。下面给出几个例子,名称前的括号为优先顺序:

- (1) 2-苯基萘(2-phenylnaphthalene)
- (2) 或(4) 2-(2'-萘基萘)[2-(2'-naphthyl)azulene]
- (3) 环己基苯(cyclohexyl benzene)

1.1.1.8 环系基 由多环烃衍生而来的一价取代基,命名时将烃名的词尾“e”改为“-yl”。带有自由价的碳原子的位次应尽可能是与烃的固定编号相一致的最小编号。有几个例外是萘基(naphthyl 而不是 naphthalenyl)、蒽基(anthryl 不是 anthracenyl)和菲基(phenanthryl 不是 phenanthrenyl)。但这些缩写形式只适用于简单的环系。这些环系的稠合衍生物衍生而来的取代基用系统命名法命名。带有两个或多个自由价的基按上述的单环脂肪烃的命名方法命名。

1.1.1.9 带侧链的环烃 由环和脂链构成的烃,可以按许可的最简单的方式或最符合化学意义的方式进行命名。有若干链与一个环核相连的烃,通常是将其按环状化合物的衍生物来命名,而

有若干侧链和(或)环基与一个链相连的烃,则按开链化合物来命名。例如

2-乙基-1-甲基萘 (2-ethyl-1-methylnaphthalene)

二苯基甲烷 (diphenylmethane)

1,5-二苯基戊烷 (1,5-diphenyl pentane)

2,3-二甲基-1-苯基-1-己烯 (2,3-dimethyl-1-phenyl-hexene)

如果用复基的俗名能使命名简化,则用俗名进行命名。例如:

1-苺基萘 (benzyl-naphthalene)

1,2,4-三(3-对甲基丙基)苯 [1,2,4-tris(3-*p*-tolylpropyl)benzene]

亚甲基环戊二烯 (methylenecyclopentadiene) 的俗名“富烯 (fulvene)”和 1,2-二苯乙烯 (1,2-diphenylethylene) 的俗名“苺 (stilbene)”予以保留。

1.1.1.10 杂环系 杂环化合物的命名是将它们与相应的碳环烃联系起来用取代命名法来命名。杂原子词头的结尾用“a”标明,如表 1.3 所示。如果有两个或多个取代词头在一个名称中出现时,则按表 1.3 中排列的顺序依次列出。杂原子尽可能给以与相应的碳环烃一致的最小编号,然后才是双键或三键碳原子。位次号标示在词头或词尾之前。同一杂原子多次出现,用适当的词头二(di-)、三(tri-)、四(tetra-)、五(penta-)、六(hexa-)等表示。

表 1.3 杂环烃的特定命名(杂原子按优先顺序降低排列)

元素	化合价	词头	元素	化合价	词头
氧 Oxygen	2	氧杂 Oxa-	铋 Bismuth	3	铋杂 Bisma-
硫 Sulfur	2	硫杂 Thia-	硅 Silicon	4	硅杂 Sila-
硒 Selenium	2	硒杂 Selen-	锗 Germanium	4	锗杂 Germa-
碲 Tellurium	2	碲杂 Tellura-	锡 Tin	4	锡杂 Stanna-
氮 Nitrogen	3	氮杂 Aza-	铅 Lead	4	铅杂 Plumba-
磷 Phosphorus	3	磷杂 Phospha <sup>1)</sup>	硼 Boron	3	硼杂 Bora-
砷 Arsenic	3	砷杂 Arsa <sup>1)</sup>	汞 Mercury	2	汞杂 Mercura-
锑 Antimony	3	锑杂 Stiba <sup>1)</sup>			

1) 当词头后紧接“-in”或“-ine”时,phospha-,arsa-,stiba- 应分别改为 phosphor-,arsen-,antimon-。对应于磷(phosphorin)和砷(arsenin)的饱和六元环分别命名为磷烷(phosphorinane)和砷烷(arsenane)。另一个例外是用硼烷(borinane)代替烷基硼(borin)。

表 1.4 杂环烃特定名称的词尾

环的元数	含氮环烃		不含氮环烃	
	不饱和 <sup>1)</sup>	饱和	不饱和 <sup>1)</sup>	饱和
3	-irine	-iridine	-irene	-irane
4	-ete	-etidine	-ete	-etane
5	-ole	-olidine	-ole	-olane
6	-ine <sup>2)</sup>	3)	-in	-ane <sup>4)</sup>
7	-epine	3)	-epin	-epane
8	-ocine	3)	-ocin	-ocane
9	-onine	3)	-onin	-onane
10	-ecine	3)	-ecin	-ecane

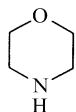
1) 指相应于最大非累积双键数的不饱和度,杂原子价数为表 1.3 给出的正常价。

2) 对于磷、砷、锑、硼,见表 1.3 注。

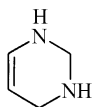
3) 在相应的不饱和化合物名称前加词头“全氢化(perhydro-)”。

4) 此方法不适用于硅、锗、锡、铅。

若相应的碳环被部分或全部氢化,则用“*H*”或“氢化(hydro-)”词头标明额外氢。必要时,可采用表 1.5 和表 1.6 中的俗名及氢化状态。在杂环系的特定命名法中,表 1.3 中的词头可以与表 1.4 中的适当词干组合使用,必要时略去“a”。可采用(1)命名法和(2)特定命名法命名的几个例子如下:



- (1) 1-氧杂-4-氮杂环己烷(1-oxa-4-azacyclohexane)  
 (2) 四氢-1,4- 噻( tetrahydro-1,4-oxazine)吗啉(morpholine)



- (1) (1,3-二氮杂-4-环己烯(1,3-diazacyclohex-4-ene)  
 (2) 1,2,3,4-四氢-1,3-二噻(1,2,3,4-tetrahydro-1,3-diazine)



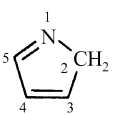
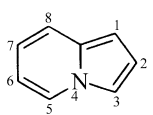
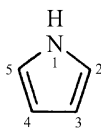
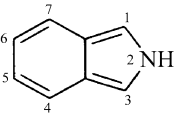
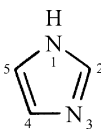
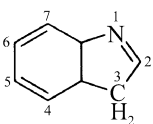
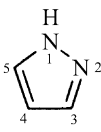
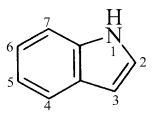
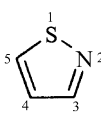
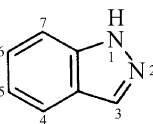
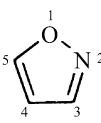
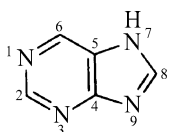
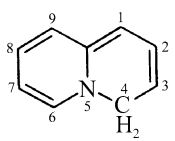
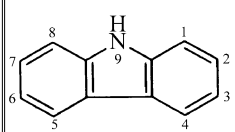
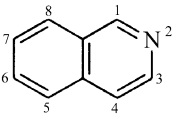
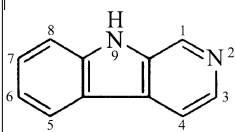
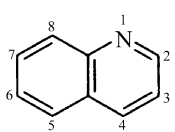
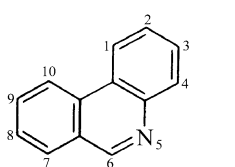
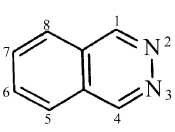
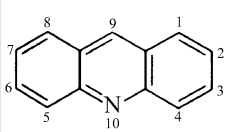
- (1) 硫杂环丙烷(thiacyclopropane)  
 (2) 硫杂丙环(thiirane)亚乙基硫(ethylene sulfide)

表 1.5 适用于稠环名称的杂环烃俗名(按作为大稠环系的递增优先顺序排列)

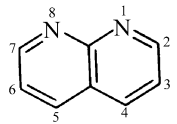
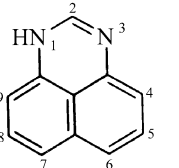
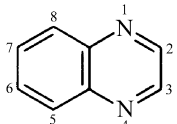
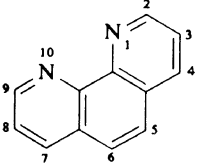
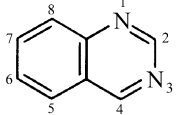
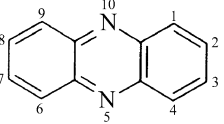
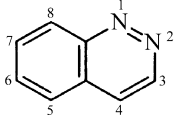
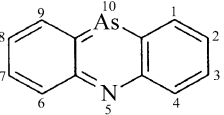
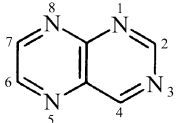
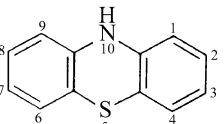
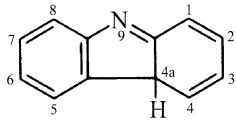
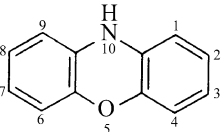
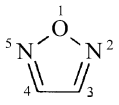
结构	母体名	基名	结构	母体名	基名
	噻吩	噻吩基		呋喃	呋喃基
	噻噁	噻噁基		吡啶	吡啶基
	异苯并呋喃	异苯并呋喃基		吡啶	吡啶基
	苯并吡喃	苯并吡喃基		吡啶	吡啶基
	咕吨 <sup>1)</sup>	咕吨基		吡啶	吡啶基
	吩噻	吩噻基		吡啶	吡啶基



续表 1.5

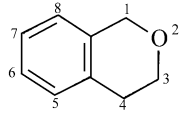
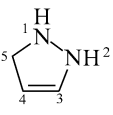
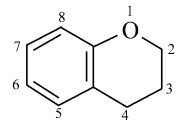
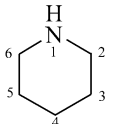
结构	母体名	基名	结构	母体名	基名
	2 <i>H</i> -吡咯	2 <i>H</i> -吡咯基		吡唑啉	吡唑啉基
	吡咯	吡咯基		异氮茛	异氮茛基
	咪唑	咪唑基		3 <i>H</i> -吡唑	3 <i>H</i> -吡唑基
	吡唑	吡唑基		吡唑	吡唑基
	异噻唑	异噻唑基		1 <i>H</i> -吡唑	1 <i>H</i> -吡唑基
	异唑	异唑基		嘌呤 <sup>1)</sup>	嘌呤基
	4 <i>H</i> -喹啉	4 <i>H</i> -喹啉基		喹啉 <sup>1)</sup>	喹啉基
	异喹啉	异喹啉基		$\beta$ -喹啉	$\beta$ -喹啉基
	喹啉	喹啉基		菲啶	菲啶基
	酞嗪	酞嗪基		吡啶 <sup>1)</sup>	吡啶基

续表 1.5

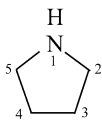
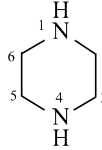
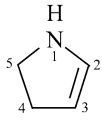
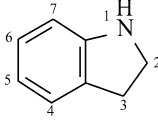
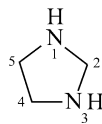
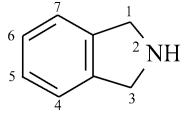
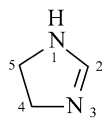
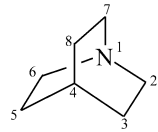
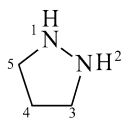
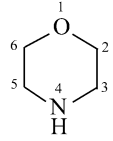
结构	母体名	基名	结构	母体名	基名
	喹啉 (1,8 位)	喹啉基		吲哚	吲哚基
	喹啉	喹啉基		菲咯啉 (1,10 位)	菲咯啉基
	喹唑啉	喹唑啉基		吩嗪	吩嗪基
	噌啉	噌啉基		吩吡嗪	吩吡嗪基
	蝶啉	蝶啉基		吩噻嗪	吩噻嗪基
	4 <i>aH</i> -吡啉 <sup>1)</sup>	4 <i>aH</i> -吡啉基		吩 嗪	吩 嗪 基
	咪唑	咪唑基			

1) 表示系统编号的例外。

表 1.6 不适于稠环名称的杂环烃俗名(按递增优先顺序排列)

结构	母体名	基名	结构	母体名	基名
	异苯并二 氢咪唑	异苯并二氢 咪唑基		吡啉 (3 位 <sup>1)</sup> )	吡啉基
	苯并二氢咪唑	苯并二氢咪唑基		哌啉	哌啉基 <sup>2)</sup>

续表 1.5

结构	母体名	基名	结构	母体名	基名
	吡咯烷	吡咯烷基		哌嗪	哌嗪基
	吡咯啉 (2 位 <sup>1)</sup> )	吡咯啉基		二氢吲哚	二氢吲哚基
	咪唑烷	咪唑烷基		异二氢吲哚	异二氢吲哚基
	咪唑啉 (2 位 <sup>1)</sup> )	咪唑啉基		奎宁环	奎宁环基
	吡唑烷	吡唑烷基		吗啉	吗啉基 <sup>3)</sup>

1) 表示双键位置。

2) 对于 1-哌啉基(1-piperidyl), 采用哌啉子基(piperidino)。

3) 对于 4-吗啉基(4-morpholinyl), 采用吗啉代(morpholino)。

杂环化合物环上去掉氢衍生而来的基, 其命名是在母体化合物名称之后加上“基(-yl)”(如母体名称的词尾有“e”, 则略去)。下面几个例外保留使用:

呋喃基(furyl) (来自呋喃, furan)

吡啉基(pyridyl) (吡啉, pyridine)

哌啉基(piperidyl) (哌啉, piperidine)

喹啉基(quinolyl) (喹啉, quinoline)

异喹啉基(isoquinolyl)

噻吩基(thienyl) (噻吩, thiophene)

糠基(furfuryl) (指 2-呋喃甲基, 2-furyl methyl)

亚糠基(furfuridene) (指 2-呋喃亚甲基, 2-furylmethylene)

次糠基(furfuridyne) (指 2-呋喃次甲基, 2-furylmethylidyne)

噻吩甲基(thenyl) (指噻吩基甲基, thienyl methyl)

噻吩亚甲基(thenylidene) (指噻吩基亚甲基, thienyl methylene)

噻吩次甲基(thenylidyne) (指噻吩基次甲基, thienyl methylidyne)

1-哌啉基(1-piperidyl)和 4-吗啉基(4-morpholinyl)最好用哌啉子基(piperidino-)和吗啉代(morpholino-)代替。

如果杂环之间有不同选择, 则母体化合物按下列顺序来确定:

- (1) 含有氮的组分；
- (2) 没有氮的情况下,含有表 1.3 中尽量靠前的单杂原子组分；
- (3) 环数最多的组分；
- (4) 含最大环的组分；
- (5) 含任一种杂原子最多的组分；
- (6) 含杂原子种类最多的组分；
- (7) 含表 1.3 中靠前部分的杂原子数目最多的组分。

如果在两个杂原子数目和种类相同、环的大小相同的组分之间有不同选择,则选择稠合前杂原子编号小的那个组分作为基本组分。当稠合位置被杂原子占据时,就选择此含杂原子、被稠合的组分作为母体名称。

### 1.1.2 官能团化合物

有机化合物的命名系统有好多种。从化合物的性质来看,采用何种命名系统有时是显而易见的。一般来说,取代命名法比较常用,因为它适用广。但在某些情况下,根基官能团命名法、加成命名法和置换命名法更为方便。

**1.1.2.1 取代命名法** 采用取代命名法时,第一步是确定作为母体化合物主基团的特征基团(官能团)属于何种类型。特征基团就是能赋予其所在分子以特征化学性质的原子团,就命名而言,不把碳-碳不饱和键和环上的杂原子看成官能团。

“取代”意味着给定化合物中有一个或多个氢原子被其他种类的一些官能的或非官能的原子或原子团所置换。在取代命名法中,把每个取代原子或基团,或作为词头或作为词尾加在它所连接的母体(或取代基)名称前后。后者表示母体化合物(或基的母体基团)。

表 1.7 按优先递减顺序列出了作为词尾即作为母体或特征化合物的一般类型。当氧被硫、硒、碲置换时,这些元素的优先顺序按递减列于表中,每一元素的高价态列在各自的低价态之前。衍生基团引作主要基团的优先程度排在其所属总类的相应母体之后。

表 1.7 取代命名中的特征基团(按主要基团或母体名称的优先递减顺序排列)


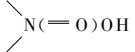
类别	化学式 <sup>1)</sup>	词头	词尾
1. 正离子(cations)		鎏-onio-	鎏-onium
	H <sub>4</sub> N <sup>+</sup>	铵-ammonio-	铵-ammonium
	H <sub>3</sub> O <sup>+</sup>	氧鎏-oxonio-	氧鎏-oxonium
	H <sub>3</sub> S <sup>+</sup>	硫鎏-sulfonio-	硫鎏-sulfonium
	H <sub>3</sub> Se <sup>+</sup>	硒鎏-selenonio-	硒鎏-selenonium
	H <sub>2</sub> Cl <sup>+</sup>	氯鎏-chloronio-	氯鎏-chloronium
	H <sub>2</sub> Br <sup>+</sup>	溴鎏-bromonio-	溴鎏-bromonium
	H <sub>2</sub> I <sup>+</sup>	碘鎏-iodonio-	碘鎏-iodonium
2. 酸(acids)			
羧酸(carboxylic)	—COOH	羧基 carboxy-	羧酸-carboxylic acid
	—(C)OOH		-oic acid
	—C(=O)OOH		过氧酸-pero...carboxylic acid
	—(C=O)OOH		-peroxy...oic acid
磺酸(sulfonic)	—SO <sub>3</sub> H	磺酸基 sulfo-	磺酸-sulfonic acid
亚磺酸(sulfinic)	—SO <sub>2</sub> H	亚磺酸基 sulfino-	亚磺酸-sulfinic acid
次磺酸(sulfenic)	—SOH	次磺酸基 sulfeno-	次磺酸-sulfenic acid
盐(salts)	—COOM		羧酸某盐 metal...carboxylate

类别	化学式 <sup>1)</sup>	词头	词尾
	—(C)OOM		metal...oate
	—SO <sub>3</sub> M		磺酸某 metal...sulfonate
	—SO <sub>2</sub> M		亚磺酸某盐 metal...sulfinate
	—SOM		次磺酸某盐 metal...sulfenate
3. 酸的衍生物 (derivative of acids)			
酸酐(anhydrides)	—C(=O)OC(=O)— —(C=O)O(C=O)—		酸酐-carboxylic anhydride -oic hydride
酯(esters)	—COOR —C(OOR)	烷氧羰基 R-oxycarbonyl-	某酸某酯 R...carboxylate R...oate
酰卤(acid halides)	—CO—卤素	卤甲酰基 halo formyl-	(甲)酰卤-carbonyl halide
酰胺(amides)	—CO—NH <sub>2</sub> (C)O—NH <sub>2</sub>	氨甲酰基 carbamoyl-	(甲)酰胺-carboxamide -amide
酰肼(hydrazides)	—CO—NHNH <sub>2</sub> —(CO)—NHNH <sub>2</sub>	肼代羰基 carbonyl hydrazino-	甲酰肼-carbohydrazide -ohydrazide
酰亚胺(imine)	—CO—NH—CO—	亚胺二甲酰 R-imido-	二(甲)酰亚胺-carboximide
咪(amidines)	—C(=NH)—NH <sub>2</sub> —(C=NH)—NH <sub>2</sub>	咪基 amidino-	咪-carboxamidine -amidine
4. 腈(氧化物) [nitrile(cyanide)]	—CN —(C)N	氰基 cyano-	腈-carbonitrile -nitrile
5. 醛(aldehydes)	—CHO —(C=O)H	甲酰基 formyl- 氧代 oxo-	醛-carbaldehyde -al
	(及其类似物 和衍生物)		
6. 酮(ketones)	 (及其类似物 和衍生物)	氧代 oxo-	酮-one
7. 醇(alcohols) (和酚 phenols)	—OH	羟基 hydroxy-	醇-ol
硫醇(thiols)	—SH	巯基 mfercapto-	硫醇-thiol
8. 氢过氧化物 (hydroperoxides)	—O—OH	氢过氧基 hydroperoxy-	
9. 胺(amines)	—NH <sub>2</sub>	氨基 amino-	胺-amine
亚胺(imines)		亚氨基 imino-	亚胺-imine
肼(hydrazines)	—NHNH <sub>2</sub>	肼基 hydrazino-	肼-hydrazine
10. 醚(ethers)	—OR	烷氧基 R-oxy-	
硫醚(sulfides)	—SR	烷硫基 R-thio-	
11. 过氧化物(peroxides)	—O—OR	烷过氧基 R-dioxy-	

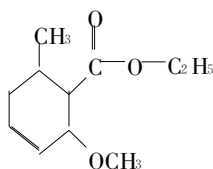
1) 母体化合物名称中包括括号中的碳原子, 而词头和词尾中不包括。

表 1.8 汇列了在取代命名法中只作为词头(决不能作为词尾)列出的特征基团。就命名来说, 它们的排列顺序是无关紧要的。

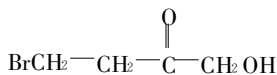
表 1.8 在取代命名中只作为词头列出的特征基团

特征基团	词头	特征基团	词头
—Br	溴代 bromo-	—IX <sub>2</sub>	X 可以是卤素或基团：二卤碘代- (dihalogenoiodo-)或二乙酸碘代- (diacetoxiyodo-)；例如-ICl <sub>2</sub> 的词 头是二氯碘代-(dichloroiodo-)
—Cl	氯代 chloro-		重氮基 diazo-
—ClO	次氯酰 chlorosyl-	—N <sub>3</sub>	叠氮基 azido-
—ClO <sub>2</sub>	亚氯酰 chloryl-	—NO	亚硝基 nitroso-
—ClO <sub>3</sub>	过氯酰 perchloryl-	—NO <sub>2</sub>	硝基 nitro-
—F	碘代 iodo-		酸式硝基 aci-nitro-
—I	氟代 fluoro-	—OR	烷氧基 R-oxy-
—IO	亚碘酰 iodosyl-	—SR	烷硫基 R-thio-
—IO <sub>2</sub>	碘酰 iodyl-	—SeR(—TeR)	烷硒基 R-seleno-(烷碲基 R-telluro-)
—I(OH) <sub>2</sub>	二羟基碘代 dihydroxyiodo-		

除了作为酸命名的化合物以外,采用取代命名法所得到的系统名称都是单个词。命名时,首先从列于表 1.7 最靠前的特征基团中选出母体化合物作为词尾。然后把其余所有的官能团都作为词头处理,按字母顺序一一放置于母体名称之前。从下面两个例子可以看出,结构 I 含有一个酯基和一个醚基。由于酯基比较优先,因而命名为 2-甲氧基-6-甲基-3-环己烯-1-羧酸乙酯(ethyl 2-methoxy-6-methyl-3-cyclohexene-1-carboxylate)。结构 II 含有一个羰基、一个羟基和一个溴(bromo),后者从来都不作为词尾。在羰基和羟基二者之中,羰基比较优先,相应的母体词尾是酮(-one),故此化合物命名为 4-溴代-1-羟基-2-丁酮(4-bromo-1-hydroxyl-2-butanone)。



结构 I



结构 II

主脂环链或主环系的选择,取决于下列原则:

- (1) 对于纯脂环化合物,按下列原则依次选择,直至作出决定:(a)相应于表 1.7 中列在最前面的特征基团的取代基数目最多;(b)双键和叁键的总数最多;(c)链最长;(d)双键数最多。其他准则,如果命名复杂化合物时需要,可参考 IUPAC 有关原则。
- (2) 如果特征基团只存在于带有环取代基的链上,那么此化合物按脂族化合物来命名,环状组分作为取代基,并用基的词头表示。这种链不要求是最长的链。
- (3) 如果特征基团存在于多个碳链上,并且这些链彼此之间不直接相连,那么选作母体的链应是带特征基团数目最多的链。如有必要,再次按规则(1)进行选择。
- (4) 如果特征基团只存在于一个环系中,则选此环系作为母体。
- (5) 如果特征基团存在于多个环系中,选作母体的环系应是(a)带主基团最多的环系,或者未能作出判断时,则是(b)其中较大的环系。
- (6) 如果特征基团同时存在于链和环上,则母体是含主基团最多的那部分。如果链与环上的主基团数目相同,则把认为是最重要的或环系大的那部分选作母体。