

杂环化合物的命名

一、杂环母核的命名

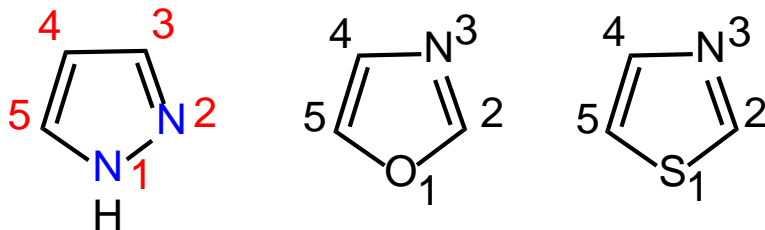
杂环化合物的命名比较复杂。我国采用“音译法”，按照英文名称的读音，选用同音汉字加“口”旁组成音译名，其中“口”代表环的结构。

1. 含一个杂原子的杂环：

含一个杂原子的杂环从杂原子开始编号。

2. 含两个或多个杂原子的杂环：

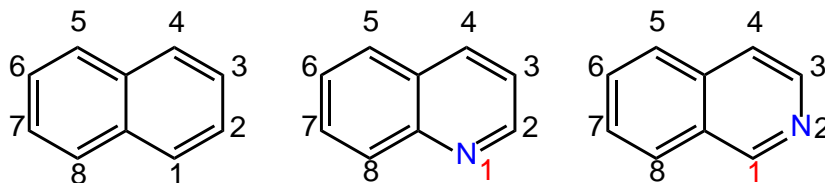
含两个或多个杂原子的杂环编号时应使杂原子位次尽可能小，并按O、S、NH、N的优先顺序决定优先的杂原子，



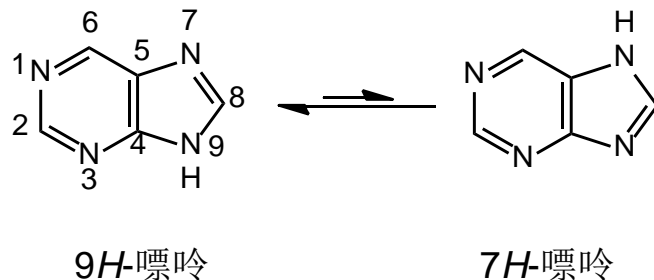
杂环化合物的命名

3. 有特定名称的稠杂环的编号有其特定的顺序：

苯并杂环的稠杂环化合物，编号方式与稠环芳烃相同，但编号一般从杂原子开始，然后再编杂环。



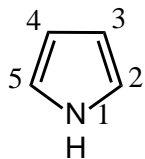
少数稠杂环化合物有另外的编号顺序。



杂环化合物的命名

4. 标氢:

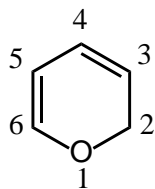
即杂环中**拥有最多数目的非聚集双键**（已经含有最多的双键）。当杂环满足了这个条件后，环中仍然**有饱和的碳原子或氮原子**，则这个饱和的原子上所连接的氢原子称为“**标氢**”或“**指示氢**”。用其**编号加*H***（大写斜体）表示。



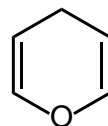
1*H*-吡咯



2*H*-吡咯

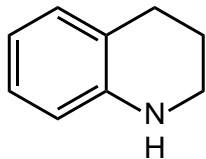


2*H*-吡喃

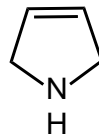


4*H*-吡喃

若杂环上尚未含有最多数目的**非聚集双键**（并非含有最多的双键），则多出的**氢原子称为外加氢**。命名时要指出氢的位置及数目，全饱和时可不标明位置。



1,2,3,4-四氢喹啉



2,5-二氢吡咯

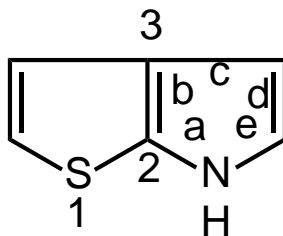
杂环化合物的命名

二、无特定名称稠杂环的命名

绝大多数稠杂环无特定名称，可看成是两个单杂环并合在一起（也可以是一个碳环与一个杂环并合），并以此为基础进行命名。

1. 基本环与附加环的确定：

稠杂环命名时，先将稠合环分为两个环系，一个环系定为基本环或母环；另一个为附加环或取代部分。命名时附加环名称在前，基本环名称在后，中间用“并”字相连。



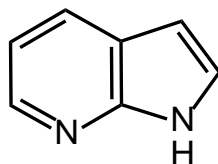
噻吩并[2,3-*b*]吡咯

基本环的选择原则：

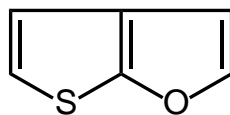
a) 碳环与杂环组成的稠杂环，选**杂环**为基本环。

杂环化合物的命名

b) 由大小**不同**的两个**杂环**组成的稠杂环，以**大环**为基本环；大小**相同**的两个**杂环**组成的稠杂环，基本环**按所含杂原子N、O、S顺序**确定。



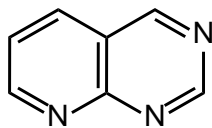
吡咯并吡啶



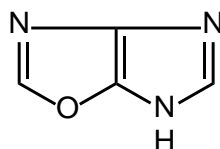
噻吩并呋喃

c) 两环大小相同，杂原子个数**不同**时，选**杂原子多**的为基本环；杂原子数目也**相同**时，选**杂原子种类多**的为基本环；

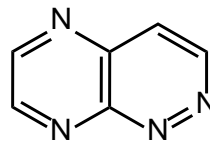
如果环大小、杂原子个数都**相同**时，以**稠合前杂原子编号较低者**为基本环。



吡啶并嘧啶



咪唑并噁唑

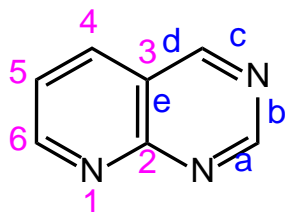


吡嗪并哒嗪

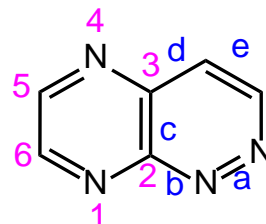
杂环化合物的命名

2. 稠合边的表示方法:

基本环按照原杂环的编号顺序，将环上各边用英文字母a、b、c...表示(编号在1, 2之间为a; 2, 3之间b...)。附加环按原杂环的编号顺序，以阿拉伯数字标注各原子。当有选择时，应使稠合边的编号尽可能小。表示稠合边位置时。(阿拉伯数字在前，中间用逗号隔开，附加环)。英文字母(基本环)在后，中间用短线相连。阿拉伯数字排列顺序相比英文字母顺序，若次序相同时数字从小到大，相反时从大到小。

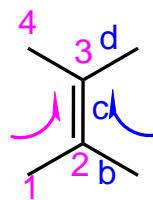
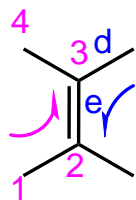


吡啶并[3,2-e]咪啶



吡啶并[2,3-c]咪啶

次序相反



次序相同

杂环化合物的命名

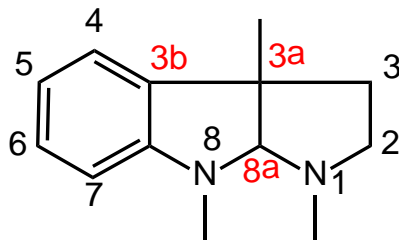
3. 周边编号:

为了标示稠杂环上的取代基、官能团或氢原子的位置，需要对整个稠杂环的环系进行编号，称为周边编号或大环编号。

a) 尽可能使所含的杂原子编号最低，在保证编号最低的前提下，再考虑按O、S、NH、N的顺序编号。

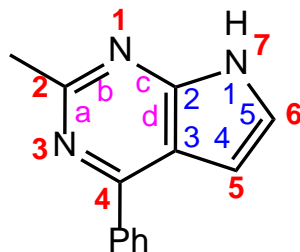


b) 共用杂原子都要编号，共用碳原子一般不编号，如需要编号时，用前面相邻的位号加a、b...表示。



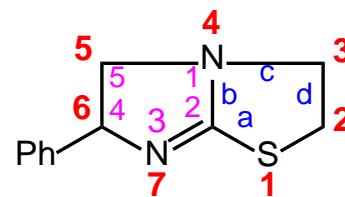
杂环化合物的命名

举例:



2-methyl-4-phenyl-7*H*-pyrrolo
[2,3-*d*]pyrimidine

基本环: 嘧啶
附加环: 吡咯
标 氢: **7*H***
稠合边: [2,3-***d***] (次序相同)
取代基: **2-甲基**, **4-苯基**
命 名: **2-甲基-4-苯基-7*H*-吡咯并**
[2,3-*d*]嘧啶

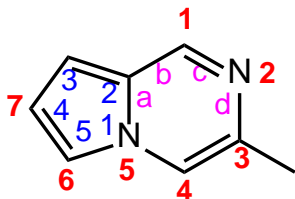


6-phenyl-2,3,5,6-tetrahydro
imidazo[2,1-*b*]thiazole

基本环: 噻唑
附加环: 咪唑
标 氢: --
稠合边: [2,1-***b***] (次序相反)
取代基: **6-苯基**
命 名: **6-苯基-2,3,5,6-四氢咪唑并**
[2,1-*b*]噻唑

杂环化合物的命名

举例:



3-methylpyrrolo[1,2-*a*]pyrazine

基本环: 吡啶

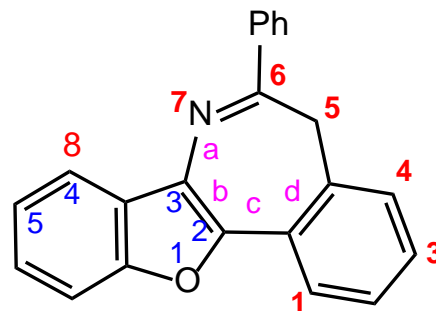
附加环: 吡咯

标 氢: --

稠合边: [1,2-*a*] (次序相同)

取代基: 3-甲基

命 名: 3-甲基吡咯并[1,2-*a*]吡啶



6-phenyl-5*H*-benzo[*d*]benzofuro
[3,2-*b*]azepine

基本环: 氮卓环

附加环: 苯并呋喃环, 苯环

标 氢: 5*H*

稠合边: [3,2-*b*], [*d*] (次序相反)

取代基: 6-苯基

命 名: 6-苯基-5*H*-苯并[*d*]苯并呋喃[3,2-*b*]氮卓