

化学药物(复杂有机物)系统命名的步骤与方法

陆世惠* 韦贤 陈前祎

(右江民族医学院药学院 百色 533000)

摘要 理解并掌握药物化学名是药学专业学生和药师在药物化学学习和药学服务工作中经常遇到的难题。本文在广泛查阅文献资料的基础上系统、详细地总结化学药物系统命名的步骤和方法,同时对《有机化合物命名原则(2017)》与《有机化学命名原则(1980)》进行对比,并结合 2 个代表药进行解释说明。该步骤和方法具有系统、详细的特点,对药学专业学生和药师理解并掌握药物化学名具有较大的帮助作用。

关键词 化学药物 系统命名 步骤 方法

The Procedure and Method of Systematic Naming of Chemical Drugs (Complex Organic Compounds)

Lu Shihui*, Wei Xian, Chen Qianhui

(College of Pharmacy, Youjiang Medical University for Nationalities, Baise, 533000)

Abstract Understanding and mastering the chemical names of drugs is a difficulty for pharmaceutical students and pharmacists in medicinal chemistry learning and pharmacy service. The procedure and method of systematic naming of chemical drugs are summarized detailedly based on extensive literature review, while the *Principles for Nomenclature of Organic Compounds* (2017) and the *Principles for Nomenclature of Organic Chemistry* (1980) are compared. The procedure and method are explained with two representative drugs. This naming method has the characteristics of being systematic and detailed, which is of great help for pharmaceutical students and pharmacists to understand and master chemical names of drugs.

Keywords Chemical drug, Systematic naming, Procedure, Method

理解并掌握药物化学名是药物化学课程的学习重点和难点之一^[1-7],也是药师在药学服务工作中经常遇到的难题。该问题的主要原因是:第一,药物结构多是复杂的,其化学名冗长难懂;第二,人民卫生出版社等出版的药学专业有机化学分散地论述各类简单化合物的系统命名,药物化学笼统概述药物的系统命名,都没有进行系统、详细的论述。目前,少数学者^[1-3]在药物化学教学中略谈了药物的化学命名问题,但没有进行系统、详细的论述。应显力等^[4]只总结了标氢、加氢的命名;何燕^[8]只归纳了部分简单有机物的系统命名;王小燕^[9]对化学药物的系统命名有过一些总结,但是不够详细,而且命名步骤和部分论

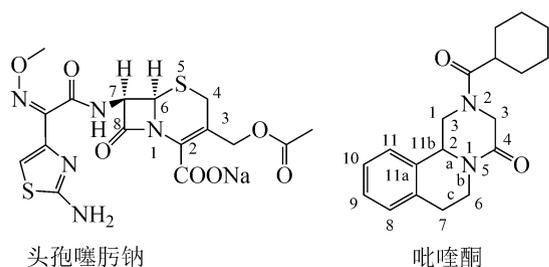
述与有机化学相悖;《有机化合物命名原则(2017)》^[10](以下简称 2017 版原则)详细论述了各类有机物的命名原则并概述了命名步骤,但是没有系统、详细论述多官能团复杂有机物的命名步骤和方法。为使药学专业学生和药师在药物化学学习和药学服务工作中更容易地理解并掌握药物化学名,本课题组参考文献^[9-16]比较系统、详细地总结了化学药物(复杂有机物)系统命名的步骤和方法。考虑到目前全国高校主要使用的药物化学教材是人民卫生出版社 2016 年出版的,且新旧命名方法还需要并行使用一段时间^[16],本文对 2017 版原则与《有机化学命名原则(1980)》^[15](以下简称 1980 版原则)进行了对

* 联系人,陆世惠 男,博士,教授,主要从事药物化学教学改革研究。E-mail: lushihui0818@126.com

2021 年度广西职业教育教学改革研究项目(GXGZJG2021B209)和 2022 年度广西高等教育本科教学改革工程项目(2022JGB294)资助

2023-08-14 收稿,2023-09-12 接受

比。化学药物系统命名共分五个步骤,下面结合头孢噻肟钠和吡喹酮(图式1)的系统命名进行解释说明。



图式1 头孢噻肟钠和吡喹酮的结构

Scheme 1 Structures of cefotaxime sodium and praziquantel

表1 常见官能团的词头、词尾名称

Tab. 1 The prefix names and the suffix names of common functional groups

序号	基团	词头名称		词尾名称	
		中文	英文	中文	英文
1	—COOH	羧基	carboxy	酸	-oic acid
2	—SO ₃ H	磺酸基	sulfo	磺酸	-sulfonic acid
3	—CO—O—CO—			酸酐	-anhydride
4	—COOR	烷氧甲酰基	R-oxycarbonyl	酯	-ate
5	—COX	卤甲酰基	halo carbonyl	酰卤	-oyl halide
6	—CONH ₂	氨基甲酰基	carbamoyl	酰胺	-amide
7	—CONHNH ₂	胍基甲酰基	hydrazinocarbonyl	酰胍	-hydrazide
8	—CO—NH—CO—			二酰亚胺	-imide
9	—SO ₂ NH ₂	氨基磺酰基	sulfamoyl	磺酰胺	-sulfonamide
10	—CN	氰基	cyano	腈	-nitrile
11	—CHO	甲酰基或氧亚基、氧代(不包括碳)	formyl; oxo	醛	-al
12	—CO—	氧亚基、氧代(不包括碳)	oxo	酮	-one
13	—OH	羟基	hydroxy	醇	-ol
14	—OH	羟基	hydroxy	酚	-ol
15	—SH	巯基	sulfhydryl; mercapto	硫醇	-thiol
16	—NH ₂	氨基	amino	胺	-amine
17	=NH	亚氨基、亚氨基	imino	亚胺	-imine
18	—NHNH ₂	胍基	hydrazino-	胍	-hydrazine

官能团词尾外还可以用“酮”“氧化物”作词尾(详见2.2.2)^[10];在有机化合物的命名未实现一物一名的情况下,从结构的观点出发,多数有机物可以有几个名称,而命名的原则要求选用较简便明确名称^[15]。

头孢噻肟钠和吡喹酮主官能团的确定见表2。

表2 头孢噻肟钠和吡喹酮主官能团的确定

Tab. 2 Determination of the main functional groups of cefotaxime sodium and praziquantel

药物	主官能团	解析
头孢噻肟钠	羧酸(盐)	羧酸(盐)优先于酯、酰胺、胺
吡喹酮	内酰胺或酮	该内酰胺以“酮”作词尾更方便命名取代基

1 分析官能团并确定主官能团

第一步,分析药物结构中含有的官能团(特性基团),并按表1选择序号最小的作为主官能团(词尾)^[10,11],其他官能团作为取代基(词头)。烷氧基、卤代、硝基、亚硝基等只作取代基。

由含氮化合物与无机酸或有机酸形成的盐,含氮化合物部分按上法命名,然后直接加“某酸盐”,或空半字符后加“位次或(构型)-某酸盐”。由羧酸与无机碱形成的盐,羧酸部分按上法命名,后加“某盐”。值得注意的是,对于内酯、内酰胺、磺内酯、磺内酰胺等化合物,除按上述顺序选择

2 根据主官能团初步确定基本骨架和母体

第二步,把含有主官能团的主链、主环系或环-链确定为基本骨架,把基本骨架与主官能团确定为母体,并对其进行编号。

2.1 开链母体

根据主链碳原子数称为“某A(酸、磺酸、酰胺、腈、醛、酮、醇、胺,等)”,把主官能团所在的位次写在“某”字后(2017版原则)或前(1980版原则)并用“-”隔开。若主链上有2、3、4个主官能团,分别指出其位次(以“,”隔开),合称“二(di-)某A”“三(tri-)某A”“四(tetra-)某A”。

命名由复杂的醇生成的酯时,把醇名称放前

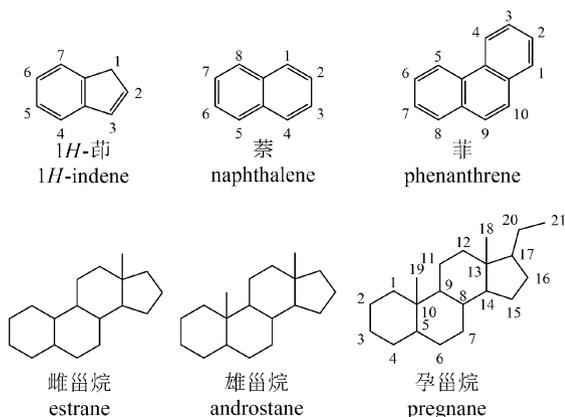
面,然后直接加“某酸酯”,或空半字符后加“位次或(构型)-某酸酯”。命名由复杂的酸、复杂的醇生成的酯时,带位次的羧酸名称在前,空半字符后(不能以“-”连接)加带位次的烃基(保留“基”字),后加“酯”字。命名由复杂多元酸与不同的醇生成的酯时,带位次的酸名称在前,空半字符后加“位次-烷基”,再空半字符后加“位次-烷(基)酯”。

2.2 环状母体

除了固定编号的环外,编号一般原则包括^[10]:(1)标氢位次最小;(2)主官能团位次最小;(3)重键位次最小;(4)取代基位次最小。按“主环系-主官能团位次-主官能团词尾”进行命名。

2.2.1 碳环

药物中常见的碳环如图式 2 所示。命名双键时,一般只标出第一个烯碳的位次(默认与下一位次碳形成双键),如 5-烯表示 5、6 位形成双键。若 2 个烯碳位次不是连续的,要在小括号中注明第二个烯碳的位次,如 5(10)-烯表示 5、10 位形



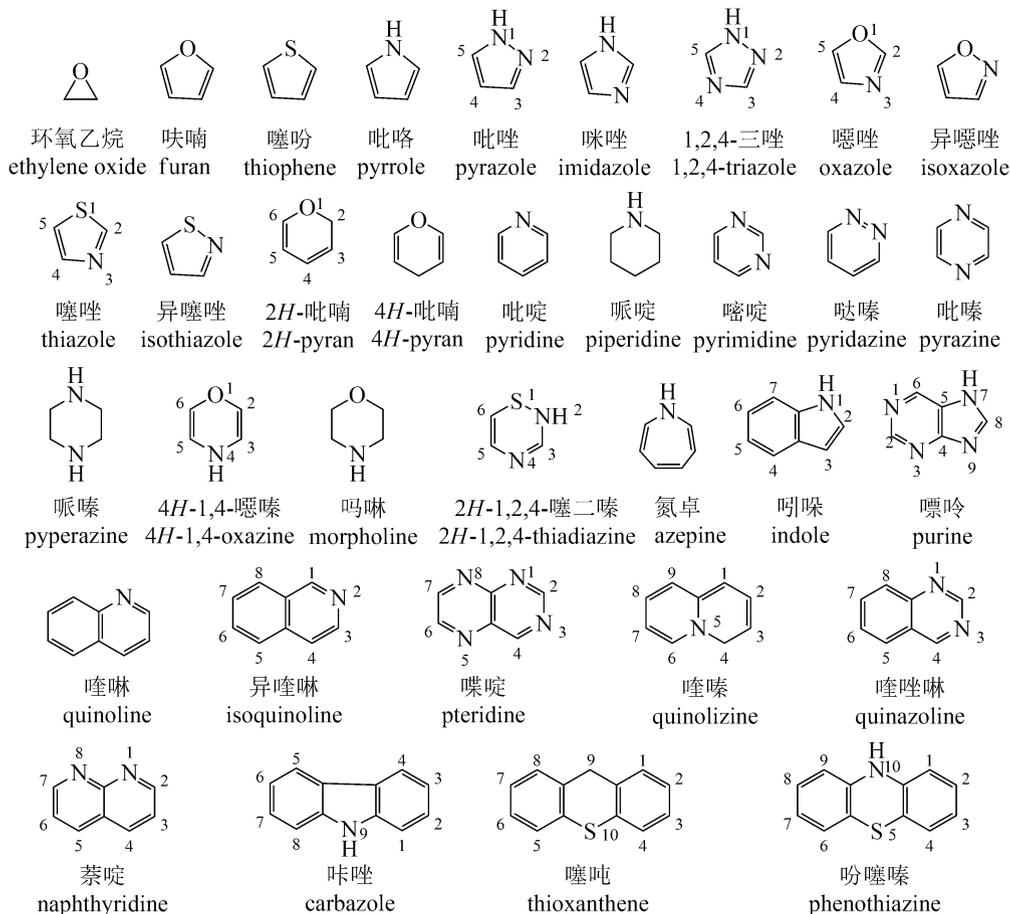
图式 2 常见的碳环

Scheme 2 Common homocyclic rings

成双键。

2.2.2 杂环

IUPAC 规定了一些杂环的俗名(习惯名称),见图式 3。杂环的编号原则是,按 O、S、饱和 N、不饱和 N 的顺序优先给杂原子最小位次(沿着环连续编号),稠杂环共用碳原子一般不编号。不过,有些杂环有特定位次。命名杂环上的酯(或酰



图式 3 常见的杂环

Scheme 3 Common heterocyclic rings

胺)时,可以给出杂环的名称,后加“位次-酮”;也可以按“某-羟基位次-内酯”(或“某-氨基位次-内酰胺”)的方式命名^[10]。命名杂环上的磺酸酯(或磺酰胺)时,可以给出相应杂环名称,空半字符后加“硫位次,硫位次-二氧化物”;也可以按“某-磺酰基位次,羟基位次-磺内酯”(或“某-磺酰基位次,氨基位次-磺内酰胺”)的方式命名^[10]。

对于没有特定名称的稠杂环,命名时通常把它当作 2 个单杂环(有俗名)合并在一起,选定一个基本环作词尾,另一个为附加环作词头,中间加“并”字。按以下顺序选择基本环^[10]:(1)杂环;(2)大杂环;(3)杂原子多;(4)按 N、O、S 顺序选择,或杂原子种类多;(5)稠合前位次小。稠合边的表示方法是,基本环的边用 *a*、*b*、*c* 编号,附加环的原子用 1、2、3 编号,并使稠合边的位次尽可能小。命名时,数字在前,字母在后,中间以“-”连接,数字的先后顺序要与基本环走向一致,置于中括号内,如咪唑并[2,1-*b*]噻唑。稠合环体系的编号原则是,从一个环的非共用原子开始,按顺时针或逆时针方向连续编号,按 O、S、饱和 N、不饱和 N 的顺序使杂原子位次最小,共用碳不编号(以前一个原子位次加 *a*、*b* 表示),共用杂原子要编号。

2.2.3 (杂)桥环

先根据环数确定词头“双环(bicyclo)”或“三环(tricyclo)”。接着在中括号内从大到小列出每条桥中所含的原子数(不包括桥头原子),数字间以“.”隔开。然后根据(杂)桥环原子总数(包括桥头原子)称“某烷”或“某-位次-烯”。编号原则

是,从一个桥头原子开始,沿着最长的桥到第二个桥头原子,再从次长的桥回到第一个桥头原子,最后给最短的桥编号。三环的第四条桥(二级桥)的桥头原子与其他 3 条桥的桥头原子不同,要在其桥原子数的右上角标注其桥头原子编号^[10]。编号优先顺序^[10]:(1)二级桥位次最小;(2)杂原子位次组最小;(3)按 O、S、N 顺序使杂原子位次最小;(4)主官能团位次最小;(5)重键位次最小;(6)取代基位次最小。最后,把“氧杂(oxa)”“硫杂(thia)”“氮杂(aza)”等作为词头缀在“双环”或“三环”前并按位次排序^[10],如 1-氮杂-4-硫杂双环[3.2.0]庚烷。

2.2.4 (杂)螺环

先写词头“螺(spiro)”,接着在中括号内从小到大列出除螺原子外的 2 个环的原子数,数字间以“.”隔开。然后根据螺环烃的原子总数(包括螺原子)称“某烷”或“某-位次-烯”。编号原则是,从紧邻螺原子的原子开始编号,先编小环,再经螺原子编大环。编号优先顺序参考 2.2.3。最后,把杂原子作为词头缀在“螺”前并按位次排序^[10],如 1,3,8-三氮杂螺[4.5]癸烷。

2.3 环-链母体

当一个环与一个带末端主官能团的饱和碳链相连时可用连接命名法,即将两者的名称连接起来作为此母体的名称^[11]。环用阿拉伯数字编号,链用希腊字母编号,主官能团的邻位为 α 位,往外依次是 β 、 γ 位。头孢噻肟钠和吡嗪酮母体的初步确定见表 3。

表 3 头孢噻肟钠和吡嗪酮母体的初步确定

Tab. 3 Preliminary determination of the parents of cefotaxime sodium and praziquantel

药物	母体	解析
头孢噻肟钠	1-氮杂-5-硫杂双环[4.2.0]辛-2-烯-2-酸钠盐	(1)把杂桥环和含主官能团的饱和碳链连接起来作母体。(2)从大到小列出桥原子数,称“双环[4.2.0]”。(3)桥头 N 编为 1 号,使杂原子位次最小。(4)双环共有 8 个原子,把杂原子按位次列在前,称“1-氮杂-5-硫杂双环[4.2.0]辛-2-烯”。(5)含主官能团的碳链连接在杂桥环的 2 位。
吡嗪酮	吡嗪并[2,1- <i>a</i>]异噻啉-4-酮	(1)大环异噻啉作基本环,小环吡嗪为附加环,称“吡嗪并异噻啉”。(2)为使稠合边位次最小,把附加环共用的 N 编为 1 号并按顺时针方向编号,确定为 1、2 位稠合。(3)异噻啉的位次是特定的,1、2 位编为 <i>a</i> 边,2、3 位编为 <i>b</i> 边,确定是 <i>a</i> 边稠合。(4)据基本环 <i>a</i> 、 <i>b</i> 、 <i>c</i> 边走向,附加环是 2、1 位稠合,称“吡嗪并[2,1- <i>a</i>]异噻啉”。(5)共用 C 不连续编号,据前位 C 编为 11 <i>a</i> 、11 <i>b</i> 。(6)主官能团“酮”在稠合环的 4 位。

3 标明基本骨架的标氢、加氢等并最终确定母体

第三步,按俗名来命名的基本骨架可能存在标氢、加氢等情况,需要辨别并标明才能最终确定母体。

(1)在不考虑官能团和取代基的条件下,分析基本骨架是否存在标氢。如果杂环或芳碳环在最多数目非累积双键条件下还存在饱和的 C、N,将产生 2 种或多种异构体,命名时需指明该饱和 C、N 上多余的氢即“标氢”(又称“指示氢”)所在的位次并加斜体大写 *H* 表示。特别值得注意的

是,有些氮杂环原来没有标氢,但是在稠杂环中 N 原子被共用后可能产生标氢。标氢列在不可分开前缀(环、双环、螺、并、降、某杂等)前、可分开前缀(取代基、加氢、脱氢等)后^[10]。

(2)分析官能团对标氢的影响。有时在杂环的双键上引入官能团(如酮),会使其邻位产生额外的氢即“新标氢”^[9],需要在该官能团位次后以小括号注明新标氢的位次并加斜体大写 H。

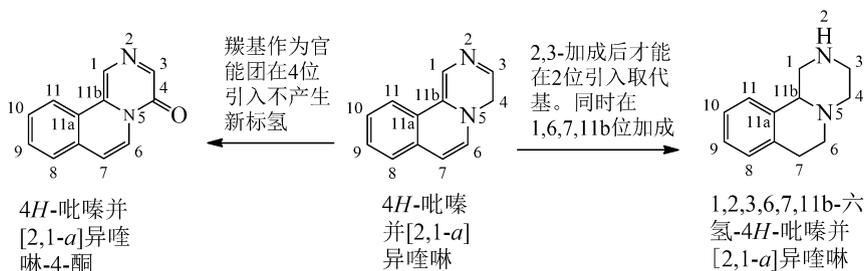
(3)分析是否存在直接加氢。绝大多数杂环和芳碳环原本含有最多数目的非累积双键,因加成(或共轭加成)而多出的氢称为“加氢”(又称

“外加氢”),需要指明加氢的位次和数目。加氢列在取代基后、不可分开前缀前。

(4)分析取代基对加氢的影响。在杂环的双键上,有时无法直接引入取代基(如氧代、烷基),需要先加成(或共轭加成)这个双键才能引入取代基。这种因引入取代基而形成的额外氢也是加氢^[9],需要指明加氢的位次和数目。

(5)分析脱氢、脱氧、脱水和脱甲基等其他情况,列在取代基后、加氢前。

头孢噻肟钠的母体是按杂桥环命名的,不存在标氢、加氢等情况。吡嗪酮的母体是按俗名来命名的,标氢、加氢的解析见图式 4。



图式 4 吡嗪酮基本骨架上的标氢和加氢

Scheme 4 Indicated hydrogen and added hydrogen at basic skeleton of praziquantel

4 命名取代基并排序

第四步,对母体以外的基团即取代基进行命名并排序。因为药物结构复杂,往往含有多个复杂的取代基,为了防止遗漏、出错,应顺着基本骨架的位次从小到大逐一命名取代基。

4.1 简单取代基的命名

对于简单取代基,直接将其位次和名称写在母体前,阿拉伯数字与汉字之间以“-”连接。当基本骨架上含有 2、3、4 个相同的简单取代基时,应分别指出其位次,并以“二某基”“三某基”“四某基”命名。值得注意的是,2017 版原则对部分取代基给出了新的名称(见图式 5,括号内为 1980 版原则名称)。

4.2 复杂取代基的命名

复杂取代基是由多个简单取代基按照一定的逻辑层次和顺序组合起来的。“基”字是划分复杂取代基逻辑层次(级别)的标志,与基本骨架直接相连的简单取代基称为一级取代基,一级取代基上的简单取代基称为二级取代基,二级取代基上的简单取代基称为三级取代基。命名方法是,从一级取代基开始,从里到外逐级命名取代基(当取代位次只有 1 个时可以省略位次)。先命

名一级取代基,如“一级取代基位次-[一级取代基名称]”;然后在一级取代基名称的括号内命名二级取代基,如“一级取代基位次-[二级取代基位次-(二级取代基名称)一级取代基名称]”;接着在二级取代基名称的括号内命名三级取代基,如“一级取代基位次-[二级取代基位次-(三级取代基位次-三级取代基名称二级取代基名称)一级取代基名称]”。如此,用小括号、中括号、大括号区分不同级别的位次和取代基,同一级取代基放在同一级括号内,大于 4 级逻辑关系的复杂取代基可以连续用多个中括号,也可以在大括号外继续使用小括号、中括号、大括号。当基本骨架上含有 2、3、4 个相同的复杂取代基时,分别指出其位次,并以“双(bis-)某基”“三(tris-)某基”“四(tetrakis-)某基”命名。对于侧链的编号,通常将与基本骨架(上一级取代基)直接相连的碳编为 1 号,具有特定位次的杂环作取代基时采用原位次。当取代基包含杂环或芳碳环时,还要分析标氢、加氢等情况并标明。

此外,命名复杂取代基时,需要准确使用“基”字,不能随意增加也不能随意省略。比如,在“4-甲基氧基苯甲酸”中,“甲基”是二级取代基,“氧基”是一级取代基且没有 4 位,“4-甲基氧

CH_3CHCH_3 	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CHCH}_3$ 	$\text{CH}_3\text{CHCH}_2-$ CH_3	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3\text{CCH}_3 \\ \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3\text{CCH}_2- \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	
丙-2-基(异丙基,1-甲基乙基) propan-2-yl(isopropyl, 1-methylethyl)	1-甲基丙基(仲丁基,2-丁基) 1-methylpropyl(sec-butyl, butan-2-yl)	2-甲基丙基(异丁基) 2-methylpropyl(isobutyl)	1,1-二甲基乙基(叔丁基) 1,1-dimethylethyl(tert-butyl)	2,2-二甲基丙基(新戊基) 2,2-dimethylpropyl(neopentyl)	
$\text{CH}_2=\text{CHCH}_2-$	$\text{HC}\equiv\text{CCH}_2-$	$-\text{CH}_2-$	$\text{H}_2\text{C}=\text{}$	$\text{HC}\equiv$	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ -\text{C}- \\ \end{array}$
丙-2-烯基(烯丙基) 2-propenyl	丙-2-炔基(炔丙基) 2-propynyl	甲叉基(亚甲基) methanediyl(methylene)	甲亚基(亚甲基) methylidene(methylene)	甲次基(次甲基) methylidyne	甲爪基 methanetriyl
$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$	$\text{CH}_3\text{CH}=\text{}$	$\text{CH}_3\text{C}\equiv$	$\text{HN}=\text{}$	$\text{O}=\text{}$	$-\text{O}-$
乙-1,2-叉基(1,2-亚乙基) ethane-1,2-diyl(ethylene)	乙亚基(亚乙基) ethylidene	乙次基(次乙基) ethylidyne	氨亚基(亚氨基) imino	氧亚基(氧代) oxo	氧桥 epoxy

图式 5 部分简单取代基

Scheme 5 Partial simple substituting groups

基”产生了逻辑矛盾;当省略“基”字称为“甲氧基”时就合并为一级取代基,位于“苯甲酸”的 4 位称“4-甲氧基苯甲酸”就符合逻辑;也可以用小括号把“甲基氧基”括起来表示它们是一个复杂取代基,位于“苯甲酸”的 4 位,称“4-(甲基氧基)苯甲酸”也符合逻辑。因此,“4-甲基氧基苯甲酸”应称为“4-甲氧基苯甲酸”或“4-(甲基氧基)苯甲酸”。再如,“4-(2-甲基丙基)庚烷”称为“4-(2-甲基丙基)庚烷”更妥当。因为“甲基”的“基”字省略后,“甲丙基”就是一级取代基、一个整体,“4-(2-甲基丙基)庚烷”中的“2”是哪个基团的 2 位就说不清楚,只有“2-甲基丙基”才能清楚地表达“2”是“丙基”的 2 位。

4.3 取代基的排序

2017 版原则规定,当同一级取代基有 2 种或 2 种以上时,中英文化学名均按取代基词首英文字母的顺序排列。在比较英文字母顺序时,iso(新)、neo(新)要参与比较,而 i-(异)、n-(正)、sec-(仲、二级)、tert-(叔、三级)、cis-(顺)、trans-(反)、di(二)、tri(三)、tetra(四)等不参与同一级取代基的比较,当置于括号内时要参与上一级取代基的比较。当字母相同时,先列出位次小的基团。而 1980 版原则规定,当同一级取代基有 2 种或 2 种以上时,中文化学名按照“次序规则”(原

子序数大的优先)排列取代基顺序,非优先基团排在前面,优先基团排在后面。头孢噻肟钠和吡嗪酮取代基的命名与排序见表 4。

5 标明药物结构的立体构型

第五步,标明药物结构中手性碳、双键和环上取代基的立体构型。只有 1 个立体构型时无需注明碳的位次,有 2 个或 2 个以上立体构型时需要注明碳的位次。基本骨架的立体构型按位次从小到大排列,以“,”隔开,一起放在小括号中(“顺”“反”除外),置于化学名的最前面,用“-”与后文连接。为避免位次混乱,取代基的立体构型不能与基本骨架的立体构型放在一起,不同级别取代基的立体构型也不能放在一起,应放在相应级别取代基前。

5.1 手性碳的构型

通常用 R/S 标明手性碳的立体构型。将与手性碳相连的 4 个基团按照“次序规则”排出先后顺序 a>b>c>d,若 a→b→c 按顺时针转初步定为 R 构型,按逆时针转初步定为 S 构型。再根据 d(一般是氢)的朝向最后确定构型,若 d 远离观察者(楔形虚线),原定构型不变;若 d 靠近观察者(楔形实线),改为相反构型。如果结构式没有标出手性碳的立体构型,一般认为是 RS 构型的

表 4 头孢噻肟钠和吡喹酮取代基的命名与排序

Tab. 4 Naming and order of the substituting groups of cefotaxime sodium and praziquantel

药物	取代基(1980)	取代基(2017)	解析
头孢噻肟钠	3-(乙酰氧基甲基)-7-[(2-氨基-4-噻唑基)(甲氧基氨基)乙酰氨基]-8-氧代	3-(乙酰氧基甲基)-7-[(2-氨基噻唑-4-基)(甲氧基氨基)乙酰氨基]-8-氧代	(1) 3 位一级取代基是甲基,二级取代基是乙酰氧基,称为“3-(乙酰氧基甲基)”。(2) 7 位一级取代基是乙酰氨基。它的 2 位上有 2 个二级取代基:一个是亚氨基,它连接的三级取代基是甲氧基,合称为“2-(甲氧基氨基)”；另一个是 4-噻唑基,其 2 位连接的三级取代基是氨基,合称为“2-(2-氨基-4-噻唑基)”。2 个二级取代基分别以 N、C 与一级取代基相连,N 优先排在后面,用括号区分不同级别取代基,故 7 位的取代基为“7-[2-(2-氨基-4-噻唑基)-2-(甲氧基氨基)乙酰氨基]”。乙酰氨基的 1 位没有 H,2 位是唯一可取代的位次,可略去取代位次。(3) 8 位氧代。(4) 3、7、8 位一级取代基分别以 C、N、O 与基本骨架相连,优先次序为 O、N、C,故一级取代基排列顺序为 3、7、8。(5) 2017 版原则改变部分取代基名称并据首字母对取代基进行排序。
吡喹酮	2-环己甲酰基	2-环己甲酰基	2 位的一级取代基是甲酰基,二级取代基是环己基,合称为“2-(环己基甲酰基)”。也可省略“基”字合并为一级取代基。

混合物。

对于甾体上的手性碳,多用 α/β 表示其取代基的立体构型,取代基在环平面上方称为 β 构型,在环平面下方称为 α 构型。

对于含有多个手性碳的糖或糖苷中的糖基,一般用 D/L、 α/β 表示它的立体构型。对开链结构的糖用费歇尔投影式按竖向书写,使羰基位于上方且位次最小,位次最大的手性碳的构型与 D-(+)-甘油醛的 C-2 构型一致(羟基在右侧)称为 D 构型,反之(羟基在左侧)称为 L 构型。对环状结构的糖用哈沃斯透视式表示时,吡喃型己醛糖(如葡萄糖、鼠李糖)的 5 位羟甲基(甲基)在环平面上方的为 D 构型,在环平面下方的为 L 构型;D 型糖中半缩醛羟基在环平面上方的为 β 构型(如 β -D-吡喃葡萄糖的 1 位羟基与 5 位羟甲基都在环平面上方,两者同侧),在环平面下方的为 α 构型(如 α -D-吡喃葡萄糖的 1 位羟基在环平面下方,5 位羟甲基在环平面上方,两者异侧),L-型糖的情况相反。

此外,可以同时指出旋光异构体的旋光方向,(+)和 *d* 都表示右旋,(-)和 *l* 都表示左旋,(±)和 *dl* 都表示外消旋体。需要注意的是,D 型可以是左旋体也可以是右旋体,*d*、*l* 与 D、L 之间没有必然联系。

5.2 双键的构型

将每个烯碳(氮)上的 2 个取代基按次序规则排列,优先基团在双键同侧的为 *Z* 构型,在异侧的为 *E* 构型。若 2 个烯碳(氮)连有相同的原子或基团,2 个相同基团在双键同侧的为顺式(*cis*-),在双键异侧的为反式(*trans*-)。注意,顺、反与 *Z*、*E* 之间没有必然联系,即顺式不一定是 *Z* 构型,反式也不一定是 *E* 构型。环内双键

是刚性的,没有顺反异构体,无需标明立体构型。

5.3 单环上取代基的构型

当一个环上带有 2 个或 2 个以上取代基时,若分子存在对称平面或对称中心(没有光学活性)则用顺反表示其构型:环上有 2 个取代基时,它们在环平面的同侧称为顺式(*cis*-),在异侧称为反式(*trans*-);有多个取代基时,以低位次者(主官能团)为参照(*r*),其余用 *cis*-,*trans*-表示。若分子不存在对称平面也不存在对称中心则用 *R/S* 表示其构型。

5.4 桥环上取代基的构型

取代基在最长桥、次长桥构成的平面上方称为 *exo*,在平面下方称为 *endo*,最短桥上的取代基靠近最长桥一侧称为 *syn*,远离最长桥一侧称为 *anti*。

头孢噻肟钠和吡喹酮立体构型的分析见表 5。

6 小结与讨论

从上述五个步骤可以看出,按照 2017 版原则,药物化学名的组成与一般格式为:(基本骨架构型)-取代基位次-[取代基构型]-取代基加氢-取代基标氢-取代基名称]-基本骨架加氢-基本骨架标氢-基本骨架-主官能团位次-主官能团词尾。为使名称紧凑、明晰,命名中用中文半字的标点符号。有些化学名不含全部组成部分。当不存在基本骨架构型时可以把不含位次的取代基构型放在最前面。而 1980 版原则把主官能团位次放在基本骨架前。

化学药物系统命名的步骤与方法是本课题组在参考大量文献的基础上总结出来的,具有系统、

表 5 头孢噻肟钠和吡嗪酮立体构型的分析

Tab. 5 Analysis of the configurations of cefotaxime sodium and praziquantel

药物	化学名(1980)	化学名(2017)	立体构型解析
头孢噻肟钠	(6 <i>R</i> , 7 <i>R</i>)-3-(乙酰氧基甲基)-7-[(2 <i>Z</i>)-(2-氨基-4-噻唑基)(甲氧基亚氨基)乙酰氨基]-8-氧代-1-氮杂-5-硫杂双环[4.2.0]辛-2-烯-2-羧酸钠盐 ^[9,13]	(6 <i>R</i> , 7 <i>R</i>)-3-(乙酰氧基甲基)-7-[(2 <i>Z</i>)-(2-氨基噻唑-4-基)(甲氧基亚氨基)乙酰氨基]-8-氧亚基-1-氮杂-5-硫杂双环[4.2.0]辛-2-烯-2-羧酸钠盐 ^[9,10,13]	(1) 基本骨架的 C-6 分别与 S、N、C-7、H 连接, 优先次序 S(a)>N(b)>C(c)>H(d), S(a)→N(b)→C(c) 按顺时针转初步定为 <i>R</i> 构型, 再看 H(d) 远离观察者, 最终确定 6 <i>R</i> 构型。(2) 基本骨架的 C-7 分别与 N、C-8、C-6、H 连接, C-8 连接原子中序数最大的是 O, C-6 连接原子中序数最大的是 S, 优先次序为 N(a)>C-6(b)>C-8(c)>H(d)。N(a)→C-6(b)→C-8(c) 按顺时针转初步定为 <i>R</i> 构型, 再看 H(d) 远离观察者, 最终确定 7 <i>R</i> 构型。(3) 乙酰氨基的 C-2' 有碳氮双键, C-2' 连接的 C-1' (羰基, 连接 O) 优先于 C-4' (噻唑基, 连接 N), N 连接的 O 优先于 O 号原子, 从结构式看优先基团在双键的同侧, 确定为 <i>Z</i> 构型。(4) 基本骨架的立体构型 (6 <i>R</i> , 7 <i>R</i>) 写在化学名的最前面, 7 位取代基的立体构型 (2 <i>Z</i>) 写在该取代基中。
吡嗪酮	(±)-2-环己甲基-1,2,3,6,7,11b-六氢-4 <i>H</i> -吡嗪并[2,1- <i>a</i>]异喹啉-4-酮 ^[9,13]	(±)-2-环己甲基-1,2,3,6,7,11b-六氢-4 <i>H</i> -吡嗪并[2,1- <i>a</i>]异喹啉-4-酮 ^[9,13]	C-11b 是手性碳, 但结构式中没有标明 H-11b 的朝向, 可认为是 <i>R</i> 、 <i>S</i> 构型的混合物

详细的特点。在总结的过程中, 若不同文献对同一问题的论述有矛盾则以 2017 版原则为准, 而有些具体方法则是在遵守 2017 版原则的条件下演绎或归纳出来的。实践表明, 该步骤和方法对药专业学生和药师理解并掌握药物化学名具有很大帮助作用。

参 考 文 献

- [1] 丛蔚, 侯桂革, 孙居锋, 等. 教育教学论坛, 2021, 49: 110~114.
- [2] 罗金花. 宜春学院学报(自然科学), 2007, 29(4): 80~81.
- [3] 廖洪利, 臧志和, 宋丽, 等. 药学实践杂志, 2009, 27(6): 471~472.
- [4] 应显力, 奉强. 广州化工, 2021, 49(6): 120~122.
- [5] 吴成柱, 王皓天, 刘大川, 等. 通化师范学院学报(自然科学), 2018, 39(6): 93~96.
- [6] 叶连宝, 罗艳, 朱大潜, 等. 药学教育, 2022, 38(2): 49~52.
- [7] 马俊杰, 黄坤, 倪欣, 等. 药学教育, 2020, 36(2): 37~40.
- [8] 何燕. 广州化工, 2021, 49(23): 148~150.
- [9] 王小燕. 常用药物的化学结构与系统命名. 上海: 第二军医大学出版社, 2002: 3~14.
- [10] 中国化学会有机化合物命名审定委员会. 有机化合物命名原则(2017). 北京: 科学出版社, 2018: 1~491.
- [11] 邢其毅, 裴伟伟, 徐瑞秋, 等. 基础有机化学. 3 版. 北京: 高等教育出版社, 2005: 58~939.
- [12] 陆涛. 有机化学. 7 版. 北京: 人民卫生出版社, 2011: 41~489.
- [13] 尤启冬. 药物化学. 8 版. 北京: 人民卫生出版社, 2016: 9~12.
- [14] 倪洲渊. 有机化学. 4 版. 北京: 人民卫生出版社, 1999: 24~363.
- [15] 中国化学会有机化学名词小组. 有机化学命名原则(1980). 北京: 科学出版社, 1983: 1~70.
- [16] 黄跟平, 赵温涛. 化学教育(中英文), 2020, 41(24): 20~24.