

# Studies on the International Nomenclature of Organic Chemistry: (I) Functional Group and Characteristic Group

Zhongmin Cao

School of Chemical Engineering, Dalian University of Technology, Dalian Liaoning  
Email: caogong2003@hotmail.com

Received: Jul. 3<sup>rd</sup>, 2017; accepted: Jul. 29<sup>th</sup>, 2017; published: Aug. 1<sup>st</sup>, 2017

---

## Abstract

It is proved that characteristic groups which have been taken by IUPAC to be synonymous with functional groups are actually substituent, and is shown that C-C multiple bonds, which should not be considered as functions by unanimous decision of CNOC, are really functional groups. A term, functional group in a narrower sense, is put forward to represent those formed from characteristic groups by substitution. Different concepts of functional group in nomenclature and general principles of organic chemistry are thus rationalized.

## Keywords

Functional Group, Characteristic Group, Nomenclature of Organic Chemistry

---

# 国际有机化学命名法研究(一)官能团与特性基团

曹忠民

大连理工大学化工学院, 辽宁 大连  
Email: caogong2003@hotmail.com

收稿日期: 2017年7月3日; 录用日期: 2017年7月29日; 发布日期: 2017年8月1日

---

## 摘要

本文阐明被IUPAC认为是同义词的特性基团与官能团实质上并不相同, 同时也说明碳-碳不饱和键本质上是官能团, 并提出狭义官能团的新概念, 解决了历史上遗留下来的有关官能团的问题, 理顺了有机化学原理与命名中官能的不同涵义。

## 关键词

官能团, 特性基团, 有机化学命名法

Copyright © 2017 by author and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

## 1. 引言

官能团, 简称官能, 是在有机化学中广泛使用、尤其是在有机化学取代命名中所必需的术语之一。早在日内瓦会议时期已开始用这一术语, 但致力于有机化学命名的化学家们对它的含义却有不同的理解。意见分歧主要是关于它的定义和碳-碳不饱和键是否属于官能等问题。经过多次有划时代意义的国际会议的召开, 出版了多种官方和非官方的有机化学命名文献, 时至今日, 虽然取代命名法已成为有机化学发展中所不可或缺的化学语言[1], 但有关官能团的问题仍未能得到彻底解决。本文从历史发展和化学原理两个方面对所存在的问题进行了探讨, 提出解决官能团问题的个人意见。

## 2. 有关官能问题的历史回顾

官能问题的发生和发展在《有机化学命名历史》[2]中有较详细的记载。日内瓦命名法最早使用官能团这一名词。当时对于各类化合物官能团的化学式的理解同现代有机化学教材中所讲的基本上相同, 只是不包括碳-碳不饱和键[3]。日内瓦会议文件中虽多处使用官能一词, 但未作出明确定义[2a]。著名化学家 Grignard 认为碳-碳不饱和键应该是官能[2a]。持有不同看法的是法国化学家 Combes, 《有机化学命名历史》中对于 Combes 的官能团定义有如下记载:

“Combes indicated clearly what he understood by the term functional groups: ‘the modifications brought about by substitution of a *saturated or unsaturated hydrocarbon skeleton*’ (italics by Combes)” [2b]。

可以看到, Combes 是通过官能团在取代命名中的应用作出官能团的定义。确切的定义揭示事物特有属性[4]。在取代命名的具体应用中所表现的性质, 只是官能团的片面属性, 如官能团必须含有杂原子, 不饱和碳氢基不能作为官能团等, 而非它特有的, 全面的属性。所以 Combes 的定义具有片面性。再者, 定义中“取代所引起的变更”词义含混, 这里“变更”可能是指取代引入、机械地改变母体构造的基; 也可能是指经取代在化合物分子中形成的、体现化合物主要化性的基。这就埋下了此后对于官能团的误解(见下)。但 Combes 的定义被化学命名工作者所接受, 对于有机化学命名的发展有深远影响。曾连续三十七年任 IUPAC 有机化学命名委员会主席的 Verkade 在他的《有机化学命名历史》一书中, 对这一定义推崇备至, 认为它“虽非官方的, 但有决定性意义” [2c], Combes 对于官能团的观点也就成为此后取代命名中定义官能团的指导思想。

第一次世界大战后国际化学联合会(IUC)有机化学命名法修改委员会(Commission on the Reform of the Nomenclature of Organic Chemistry)修改日内瓦命名法, 于 1927 年提出修改报告第一稿。其中有关官能团问题遵循 Combes 的观点, 认为碳-碳不饱和键不是官能, 但第二年公布第二稿却承认碳-碳不饱和键是官能[2d]。最后第二稿获得通过, 成为《修改命名法委员会最终报告》[5], 即 IUPAC 所确定的列日规则[6a]。Verkade 对于将碳-碳不饱和键列入官能团范畴[5a]很不以为然[2d], 认为这可能是由于 Grignard 施加影响所致[2c]。CA 支持碳-碳不饱和键是官能团的规定[7a], 并提出无组成元素限制的官能

团定义：“It is customary to use the term ‘function’ to mean, in its broadest sense, any atom, group or arrangement which causes a compound to behave in some characteristic way” [7b]。

这一定义与 Combes 的定义完全不同，是从官能的特有属性(官能性)出发，避免了官能团有元素组成限制的片面性。当前有关有机化学基本原理文献中的官能团定义与 CA 定义基本一致。列日规则未提出官能团定义，仍然沿用过去官能团的化学式，但提出了主官能(principal function) [5b]的新概念。

第二次世界大战后，国际纯化学与应用化学联合会(IUPAC)中的有机化学命名委员会(CNOC)对于列日规则进行修改和扩大，并编写《IUPAC 有机化学命名法》，在 1979 年汇编出版了为人熟知的“蓝皮书”(Blue Book)。CNOC 完全遵循 Combes 对于官能团化学元素组成限制的片面观点。所以在编写“蓝皮书”时，官能团定义的提案，多从官能团在命名中的应用出发，考虑到官能团的元素组成，却忽略了它的特有属性。曾经提出的定义提案中典型的例子如“官能是非完全由碳和氢组成的基”，“无机原子或基称为官能”等[2f]。描述化学组成的提案多种多样，一时无法形成能获得通过的定义，以至于 1958 “蓝皮书”的 A 部和 B 部出版时，A 部的术语汇编(glossary) [6b]中未能包括官能定义[2g] [2h]。但在未能形成获得通过的官能定义之前，竟于 1954 年一致通过了碳-碳不饱和键不应认为是官能的决议[2f]。直到“蓝皮书”C 部出版前 Cahn 编初稿时，才最后提出如下的 IUPAC 官方的官能团定义[2d]：

“In the following rules the word ‘function’ is used to denote any atom or group of atoms incorporated into a parent compound otherwise than directly through a carbon atom, but it includes  $-C \equiv N$  and  $>C=X$  where  $X = O, S, Se, Te, NH$  or substituted  $NH$ .”

1956 年出版的“蓝皮书”C 部中官能定义基本保留了 Cahn 的原文，但将“官能团”一词改为“特性基团”(characteristic group) [6c] [2d]，官能团定义变成了特性基团定义。有关官能团的争论就成为特性基团是否官能团的争论。

### 3. 特性基团不是官能团

根据“蓝皮书”中的定义，特性基团不可能是官能团。原因是：(1) 官能团代表分子的主要化性，当然是分子内的。定义中所谓的“引入母体的”原子或基不可能是官能团；(2) 事物的定义本应揭示事物的特有属性[4]，而“蓝皮书”中特性基团定义根本未涉及到官能团的特性，只揭示了所列举的杂原子或基的特性，所以特性基团定义是这些杂原子或基的定义，而非官能团的定义；(3) 官能团的化学式与化合物类别是对应的。如  $-CHO$  是醛类的官能团， $>C=O$  是酮类官能团。与类别无关的杂原子或基不可能是官能团。综上所述，特性基团不是官能团。“蓝皮书”C 部的术语汇编[6c]分别列出特性基团和取代基(Substituent)的定义。在特性基团的定义中，Cahn 虽然只用“incorporated into a parent compound”，而未用表示取代含义的词来说明这些杂原子或杂原子基进入母体烃的方式，但实际上，特性基团进入母体烃，与碳原子相连形成杂-碳键，结果只能是如同取代基定义所说的，通过“replacing hydrogen of a parent compound”进入母体，所以特性基团实质上是经取代形成官能团的取代基，而非官能团。

Cahn 的官能团定义中的问题在于他误解 Combes 定义中“取代引起的变更”为母体分子机械的改变，作为取代基的杂原子和杂原子基经取代，能直接成为代表化合物化性的官能团。特性基团是杂原子或杂原子基，它们含有形成官能团必需的杂原子，具备了形成官能的必要条件(necessary conditions)。但由于分子中永恒的原子间的相互作用与影响，杂原子或杂原子基进入母体后，它们本身并非必然成为官能团，只有当杂原子与碳间相互作用与影响可以忽略时，它们才可能成为在形式上(化学组成)相同的官能团。作为一价的杂原子或杂原子基的特性基团  $-OH$ ， $-NH_2$ ， $-Cl$  等就属于这种情况，经取代进入母体分子后，能形成与它本身形式相同的醇，胺，卤代烷等的官能团。但这时特性基团与官能团在形式上虽然相同，它们在本质上是存在差异的。特性基团是分子外、与分子结构无关的化学基，而官能团则是分子内的有机

组成部分,按照 Combes 定义,它是取代基在特定分子结构环境中(主要是相连碳原子)形成、代表分子主要化性的基。所以特性基团还不具备形成官能、包括永恒原子间相互影响的充分必要条件(sufficient and necessary conditions)。当特性基团的杂原子以多重键与碳相连时,碳-杂多重键就成为具有亲核加成反应的官能,这时与杂原子相连的碳原子就成为官能团的必要组成部分,如醛,酮,腈等。当连有双键杂原子的碳上同时还有其它杂原子存在时,不仅碳杂间有相互影响,杂杂间也有相互作用,结果形成以碳原子为中心的整体官能,两种特性基团分别在碳上所形成官能的特性基本上不复存在。羧酸及其衍生物的官能就是典型的例子。羧酸基本上无醛或酮所具有的易于发生亲核加成反应性质。

特性基团是取代基,可合理地说明 Cahn 的官能团定义中因将特性基团错误地等同于官能团而无法解释的一些问题。醛和酮的特性基团都是氧基,不同类别化合物(醛和酮)不可能有相同的官能团(氧基),但它们因为由相同的杂原子(氧)构成,应该由相同的取代基(氧基)提供同一杂原子。再者,有些类别化合物具有不含碳与含碳两种特性基团,后者就是“蓝皮书”中所说的特殊特性基团(Exceptional characteristic group) [6d]。同一类化合物不可能有两种不同的官能团,但为了命名方便,却可能有含碳与不含碳两种取代基,这两种不同取代基能形成同一类化合物的官能团。

1993 年出版的《有机化合物命名指南》(A Guide to Nomenclature of Organic Compounds) [8] (以下简称“《指南》”)对于有关官能团问题做了一些改正,明确地指出,特性基团是取代基,并且恢复使用官能一词:

“It has been customary to regard such substituents as *characteristic (or functional)* when the link between substituent and parent is not a carbon-carbon bond, for example  $-OH$ ,  $=O$ , and  $-NH_2$ , but many exceptions are recognized, such as  $-COOH$  and  $-C \equiv N$ ” [8a]。

《指南》在认为特性基团是取代基的情况下,仍然承认特性基团就是官能团,这不仅未能改正“蓝皮书”中特性定义的错误,反而又增添了新的矛盾,结果在取代命名中,虽然正确地将特性基团看作是取代基,但在特性基团即官能团的前提下,仍不免出现原来“蓝皮书”中取代名称后缀错误含义的问题。有关特性基团在取代命名中的应用和出现的问题将有另文探讨。

#### 4. 碳-碳不饱和键是官能团

1954 年 CNOC 一致通过了否认碳-碳不饱和键是官能的决议。《指南》对于过去否定碳-碳不饱和键是官能观点有所改变,但由于《指南》仍然错误地认为特性基团是官能团的同义词,按照特性基团的定义,不含杂原子的碳-碳不饱和键不可能是官能团,所以也就无法直接承认碳-碳不饱和键是官能团,只好避开具体代表化学式的 Function 一词,而用抽象的官能性(functionality)来概括杂原子和不饱和键[9a]。官能性是一个理论上的概念,涉及到具体问题时,不免又遇到特性基团与官能团混淆的矛盾。因此,《指南》不得不指出,对于这一术语应用范围的探讨是“无益”的[9a]。

否定碳-碳不饱和键是官能团缺乏理论依据,承认表现为亲核加成的碳-杂不饱和键是官能团,就没有理由否定碳-碳不饱和键是官能团,所以有机化学教材书中将碳-碳不饱和键列为官能团是正确的。但在命名实际运作中,碳-碳不饱和键有与官能团区分的必要,由于碳-碳不饱和键是烃母体的组成,命名的第一步首先确定的主官能团只能是经杂原子取代形成的或含杂原子的基,所以选择母体主链(principal chain)首要条件大多数主官能团并不包括碳-碳双键与三键,碳-碳不饱和键涉及到进一步考虑的条件[6e] [7c]。为了明确碳-碳不饱和键的本质,同时也表明它在命名中的特点,作者提出狭义官能团的概念。将表示取代命名中经特性基团取代形成的、不包括碳-碳不饱和键的含杂原子的官能团称为狭义官能团,借以区别 CA 广义(“in its broadest sense”)官能定义[7b]中、包括碳-碳不饱和键的官能团。碳-碳不饱和键是广义的官能团,而不是狭义的官能团。

近期出版的一本介绍 IUPAC 化学命名法专著[9]中除讲述特性基团, 列出特性基团表[9a]外, 也提出了官能团定义[9b], 并列出了官能团表[9c]。书中说明特性基团与官能团是同义的[9d], 但分别表列的特性基团与官能团却不同。它们之间的关系说明了特性基团不是官能团, 而是形成官能团的取代基。官能团表中, 除碳-碳双键和三键外, 其余主要官能团均可由相应的特性基团形成。这两个表的内容恰好说明特性基团不是官能团, 是取代母体氢原子形成官能团的取代基: 碳-碳不饱和键是官能团, 但不是由特性基团所形成的狭义官能团。

正确地处理特性基团与官能团的关系解决了历史上长期存在的有关官能团的争议, 统一了有机化学原理与取代命名中不同的官能团概念。

## 致 谢

本论文系作者遗稿。发表前承大连理工大学化工学院蒋景阳教授精心校核, 作者子女对此谨表示诚挚的谢意!

## 参考文献 (References)

- [1] Kisakurek, M.V. (Ed.) (1993) *Organic Chemistry: Its Language and Its State of the Art*.
- [2] Verkade, P.E. (1985) *A History of the Nomenclature of Organic Compounds*. D Riedel Publishing Co., Dordrecht, (a) 28; (b) 278; (c) 29; (d) 378; (e) 155; (f) 377; (g) 238; (h) 375.
- [3] (1996) *Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology*. 4th Edition, John Wiley and Sons, Inc., New York, 249-250.
- [4] 中央财政大学逻辑教研室. 逻辑学新教程[M]. 北京: 经济科学出版社, 2001: 103.
- [5] Patterson, A.M. (1933) Definitive Report of the Commission on the Reform of the Nomenclature of Organic Chemistry Translation with Comments. *Journal of the American Chemical Society*, **55**. (a) 3921, § 52; (b) 3921, § 51.
- [6] IUPAC Nomenclature of Organic Chemistry, Sections A, B, C, D, E, F and H, 1979 Edition, Oxford: Pergamon Press: (a) xvii; (b) xviii, glossary; (c) 81-82, glossary; (d) 89, C-0. 11; (e) 97, C-13. 11.
- [7] *Chemical Abstracts*: (a) 1945, 39: 5883, 100; (b) 1945, 39: 5876, 65; (c) *Index Guide 1992-1996, Appendix IV, Chemical Substance Index Names: 131 I, 138 Index Name Selection*.
- [8] IUPAC Commission on the Nomenclature of Organic Chemistry, Panico, R., Powell, W.H. and Richer, J.C. (1993) *A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds, Recommendations 1993*. Blackwell Science Ltd., Oxford, 59, R-310.
- [9] Leigh, G.L., Favre, H.A. and Metanomski, W.V. (1998) *Principles of Chemical Nomenclature: A Guide to IUPAC Recommendations*. In: Leigh, G.L., Ed., Blackwell Science Ltd., Oxford. (a) 85, Table 4. 11, 4. 12; (b) 15; (c) 14, Table 3. 2; (d) 84, 4. 5. 6. 1.

**期刊投稿者将享受如下服务：**

1. 投稿前咨询服务 (QQ、微信、邮箱皆可)
2. 为您匹配最合适的期刊
3. 24 小时以内解答您的所有疑问
4. 友好的在线投稿界面
5. 专业的同行评审
6. 知网检索
7. 全网络覆盖式推广您的研究

投稿请点击：<http://www.hanspub.org/Submission.aspx>

期刊邮箱：[jocr@hanspub.org](mailto:jocr@hanspub.org)