

信息素养导向下环状异构体构型命名规则的教学设计与实践

刘建全, 王香善*

江苏师范大学化学与材料科学学院, 江苏 徐州 221116

摘要: 对大学有机化学教材中“环状构型有机化合物的命名规则”进行教学设计时, 发现具有构型且相同基团的环状异构体可以采用顺反异构体命名规则; 不具有相同基团对映异构体可以使用(*R/S*)规则命名。然而, 对于既不含手性中心又无相同基团的此类化合物, 当前教材中存在命名规则的空白。本文通过文献调研, 提出针对该类化合物的系统命名法则, 可填补该类有机化合物命名规则在有机化学相关教材中的空白; 也可在大数据时代背景下, 有效利用网络和文献资源来提升学生的信息素养。

关键词: 有机化学; 顺反异构体; 对映异构体; 命名规则; 信息素养

中图分类号: G64; O6

Teaching Design and Practice of Naming Rules for Circular Isomer Configuration under the Guidance of Information Literacy

Jianquan Liu, Xiangshan Wang*

School of Chemistry and Materials Science, Jiangsu Normal University, Xuzhou 221116, Jiangsu Province, China.

Abstract: In the process of designing the teaching content for the university organic chemistry textbook on the "Naming Rules of Organic Compounds with Cyclic Configuration," we identified that cyclic isomers with configuration and identical substituents can follow the *cis-trans* isomer naming convention, while enantiomers without identical substituents are named using the (*R/S*) system. However, for compounds that neither contain chiral centers nor identical substituents, current textbooks lack a defined naming convention. This paper presents a systematic naming rule for this category of compounds, developed through literature research. The proposed rules aim to fill the gap in organic chemistry textbooks and naming manuals and provide a framework for enhancing students' information literacy in the era of big data by effectively utilizing online and documentary resources.

Key Words: Organic chemistry; *Cis-trans* isomer; Enantiomers; Naming rules; Information literacy

在目前国内很多高校使用的有机化学教材中^[1-4], 对多取代环状化合物的命名都有叙述。对于单环多取代具有构型的化合物命名法则一般都描述为: (1) 对于多取代含有相同基团的环状化合物, 可采用顺反异构体命名规则, 但是明确指出环状异构体一般不采用烯烃的(*Z/E*)系统命名法则。(2) 对于没有相同基团但有手性中心的对映异构体, 可以采用手性碳原子的命名法则, 即(*R/S*)命名规则。(3) 对于多取代单环分子中既没有相同的基团、也没有手性中心的化合物, 在有机化学教材中存在盲区——没有相关的命名规则介绍。基于上述现状, 本文以“环状异构体构型有机化合物命名规则”为教学核心, 开展教学设计: 首先, 对单环多取代化合物具有相同基团的顺反异构体、不具有相同

收稿: 2024-09-19; 录用: 2024-12-05; 网络发表: 2025-02-21

*通讯作者, Email: xswang@jsnu.edu.cn

基金资助: 江苏高校品牌专业建设工程资助项目; 江苏师范大学人才引进项目经费(16XLR013); 江苏师范大学教育教学改革研究项目(JYKTY202409)

基团但具有手性中心的对映异构体的命名规则进行总结、归纳和举例，并辅以实例说明，以帮助学生更好地理解 and 掌握这些命名规则。其次，针对上述提及的盲区——即具有构型但不含有手性中心、且不含有相同基团的环状化合物，通过课堂和文献调研，构建其系统命名法则。一方面填补这类化合物的系统命名法在教材中的空白，另一方面培养学生的系统观念和大数据时代背景下，有效利用线上网络和文献资源的信息素养。

1 具有相同基团环状异构体的命名

有机化学教材中对环状具有相同基团化合物的命名法则，讲述的比较清晰，如图1所示。教师在课堂教学中直接设计为：相同基团在环的同一侧为顺式(*cis*-)，相反在环的两侧称为反式(*trans*-)。举例讲解说明顺-1,4-二甲基环己烷的命名：两个相同基团(甲基)在环的同一侧，即左右两个甲基均在环的上侧；反-1,4-二甲基-1-乙基环己烷：两个相同基团(甲基)在环的两侧，左边甲基在环的上侧，右边甲基在环的下侧)。



图1 具有相同基团化合物的结构示例

2 具有手性中心环状异构体的命名

对于没有相同基团的化合物，教材中只强调说明不能使用烯烃的(*Z/E*)命名法则，建议使用具有手性中心化合物的系统命名法则——(*R/S*)命名法。教师在课堂教学中首先复习“次序规则”内容，将每个手性碳原子上的四个基团排序。再复习和引导学生远离最小基团，观察其他三个基团(大、中和小)的顺序，如从大基团到中等基团、再到小基团为顺时针方向，定义为(*R*)-型；逆时针方向为(*S*)-型。举例说明(1*S*, 2*S*)-1-氯-1-甲基-2-乙基环己烷的命名：左侧手性碳原子中，氯为大基团，水平向右的次甲基为中等基团，向左且向里的亚甲基为小基团，向下的甲基为最小基团，从远离最小基团(甲基)，观察大基团(氯)→中等基团(次甲基)→小基团(亚甲基)，为逆时针方向，则定义为(*S*)-构型，如图2。同样原理可以判断图2左侧化合物右侧手性中心的构型。课堂练习右侧化合物的命名，并检查学生的掌握情况。



图2 具有手性中心环状异构体的结构示例

在这类化合物命名的实际教学中，此类情况可以设计“比较顺反命名法局限性”教学环节。课堂引申练习：设计两个化合物(图3)，让学生使用两种构型命名规则命名且标注构型。

学生练习时会发现，若采用顺反命名规则，两个化合物均被命名为反-1,2-二甲基-1-乙基环己烷(因两个甲基位于环的两侧)；然而，通过系统命名法(*R/S*)分析，两者的构型差异显著：左侧化合物为(1*R*, 2*S*)，右侧化合物则为(1*S*, 2*R*)。这一结果明确表明，二者实为不同化合物。

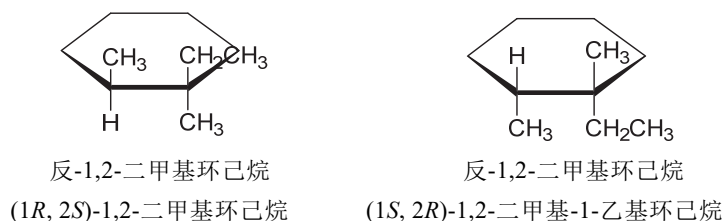


图3 具有手性中心环状异构体结构示例练习

因此，教师在课堂教学中总结道：对于含有相同基团且具备手性中心的化合物，采用(*R/S*)命名法能够更为准确地定义其构型。同时强调说明，(*R/S*)为系统命名法，对于具有手性中心的化合物命名是比较全面的、系统的、无所不包含的法则。相比之下，顺反命名法虽为常用，但具有一定的局限性，这也是辩证唯物主义的课程思政融入课堂教育教学的有效切入点。

3 具有构型但不含有手性中心且不含有相同基团环状异构体的命名

对于具有构型单环但没有相同的基团、也没有手性中心的化合物命名，教师在课堂上可以设计采用“问题导入-学生(教师)结合课本(教材)-文献调研-归纳总结”四个教学环节。

3.1 教师课堂引导示例

题目：请命名下列化合物(需标注构型)。在分析过程中，需向学生明确指出：该类化合物因分子内存在对称平面而不含手性中心，且取代基各不相同。根据教材要求，此类情况无法采用(*Z/E*)命名法，如图4。

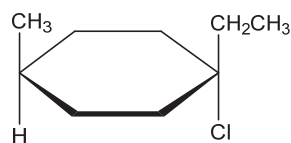


图4 问题导入示例化合物结构

3.2 学生(教师)结合课本(教材)

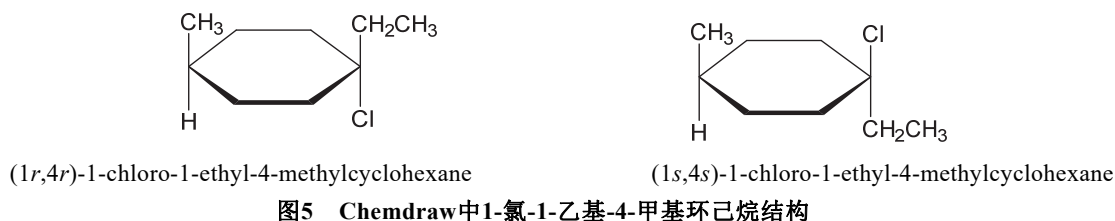
引导学生查阅课本(教材)的相关章节内容，并没有发现相关的命名规则介绍。教师课堂采用PPT展示国内外有机化学相关教材相关章节，也没有发现命名规则和具体实例。

3.3 文献调研

现有的国内外有机化学教材均存在一个盲区——没有相关的规则介绍。教师在课堂教学中，引导学生可以通过以下方式进行文献调研或检索查询：(1) 利用化学专业软件(例如Chemdraw、Indraw或Kingdraw)先画出相关化合物立体结构，再利用“结构生成命名”的功能，给出化合物的名称；(2) 登录SCIFINDER数据库，检索相关构型的化合物，并下载相关文献，列举相关的化合物命名；(3) 查询《有机化合物命名原则2017》^[5]，归纳整理该类化合物的命名法则。在具体实施中，教师在课堂上可以将学生分成三组，分别完成以上三项工作(第三项工作由教师提供《有机化合物命名原则2017》工具书)。调研结束后，各组通过提问与回答环节展示调研结果，教师利用PPT汇总学生的发现，对比分析不同方法的命名差异，最终形成系统性结论。

3.3.1 Chemdraw “结构生成命名”的功能

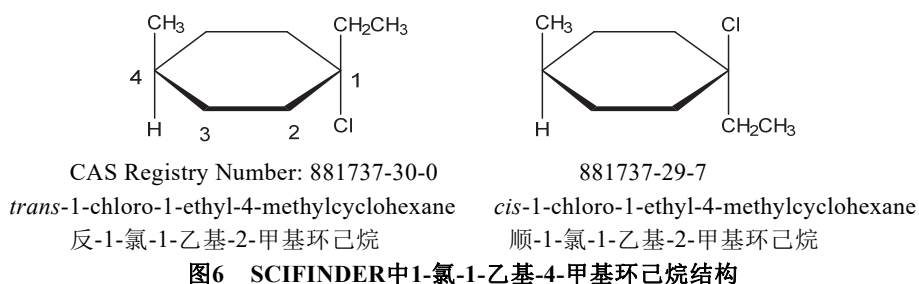
第一组学生展示在专业软件中，通过Chemdraw“结构生成命名”功能，给出的两个化合物的名称，均是采用小写的*r*或*s*来命名各自的构型，如图5。教师在课堂上集中讲授：小写的*r*或*s*是属于假手性中心的命名，不符合国际IUPAC的命名法则，是错误的命名方式。



3.3.2 SCIFINDER数据库检索结果

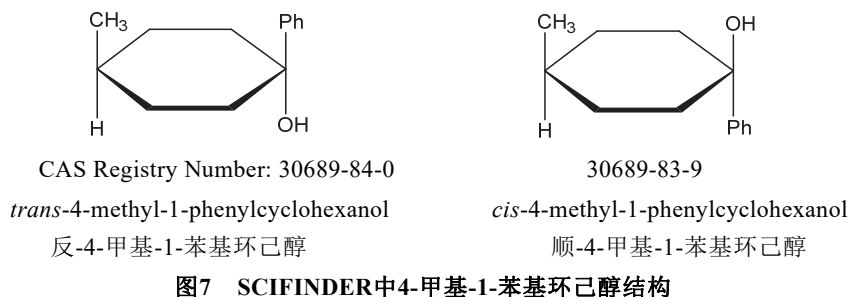
第二组学生通过检索SCIFINDER数据库,发现两个化合物均有CAS登记号码和具体的化合物名称(含构型),且具有相关的文献支持。具体信息展示如下。

1) 1-氯-1-乙基-2-甲基环己烷的两个异构体^[6],如图6。

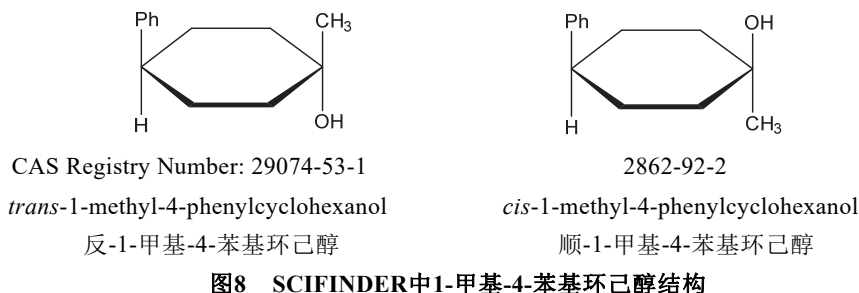


教师在课堂上再列举了其他文献中4个类似化合物(卤代烃、醇、羧酸和腈)的结构式、CAS号码和具体的名称(含英文),具体信息如下。

2) 4-甲基-1-苯基环己醇的两个异构体^[7],如图7。



3) 1-甲基-4-苯基环己醇的两个异构体^[8],如图8。



4) 1-甲基-4-氯环己基甲酸的两个异构体^[9],如图9。

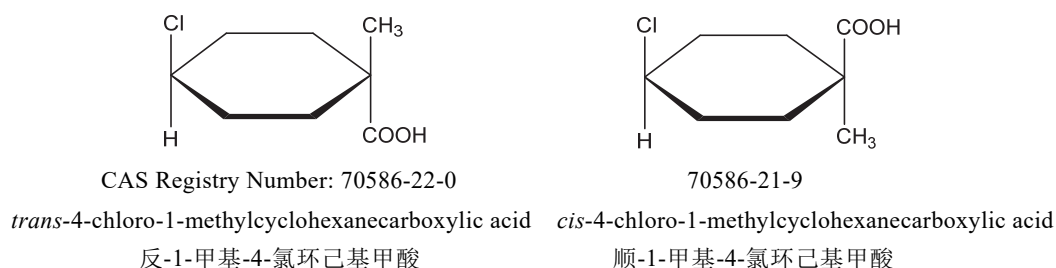


图9 SCIFINDER中1-甲基-4-氯环己基甲酸结构

5) 1-羟基-4-甲基环己基甲腈的两个异构体^[10], 如图10:

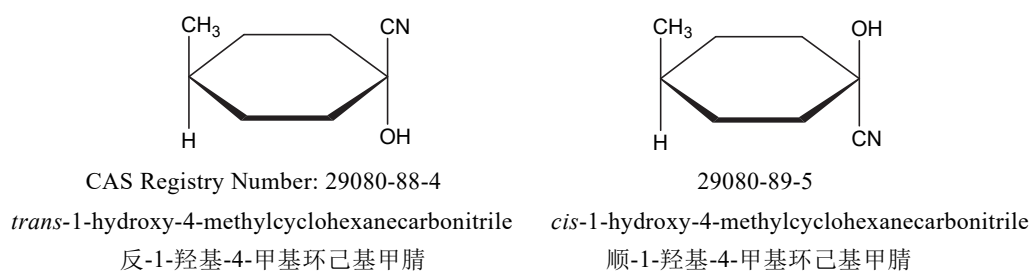


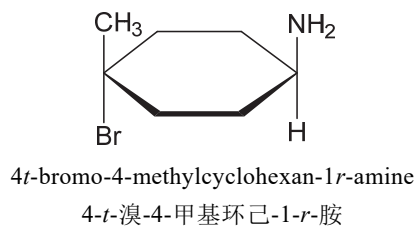
图10 SCIFINDER中1-羟基-4-甲基环己基甲腈结构

从上述例子可以看出, 尽管这些化合物的取代基各不相同且不具备手性中心(分子内存在对称面), 但文献中均给出了明确的顺反构型名称。教师讲解具体化合物的命名(图6), 由于没有相同的基团, 只能根据次序规则判断两个碳原子上基团的大小, 1号碳原子上: 氯原子(-Cl) > 乙基(-Et); 4号碳原子: 甲基(-CH₃) > 氢原子(-H)。研究发现两个碳原子连接的大基团(-Cl和-CH₃)位于环的两侧的结构, 被命名为反式构型(左侧); 在环的同侧的结构被命名为顺式构型(右侧)。同样, 在图7化合物中, 两个碳原子连接的大基团(-OH和-CH₃)位于环的两侧的结构, 被命名为反式构型(左侧); 在环的同侧的结构被命名为顺式构型(右侧)。依次, 化合物(图8-图10)均按照相同的规则被命名出相应的构型。

通过以上的文献调研, 教师归纳总结该类化合物的构型命名规则: 对于不含有手性中心、且不含有相同基团多取代具有构型的环状化合物, 应结合对映异构体(*Z/E*)命名法的次序规则(判断基团大小)和顺反异构体命名法的顺反规则(同侧或两侧)确定其构型, 即: 次序规则大基团在环的同侧, 构型为顺式; 次序规则大基团在环的两侧, 构型为反式。

3.3.3 工具书查询结果^[5]

第三组学生通过查询《有机化合物命名原则2017》, 在“环状化合物异构体的标识”章节, 查询到类似的化合物(该化合物具有构型, 但没有相同基团且不具有手性中心)命名, 如图11。


 图11 4-*t*-溴-4-甲基环己-1-*r*-胺结构图

教师课堂讲授：其中，“*t*”是“*trans*”（反式）的简写符号；“*r*”是“reference substituent”（对照基团）的简写符号。IUPAC-2013建议采用在取代基位次后加“*r*”“*t*”或“*c*”来标识他们的相对构型。具体规则为：选择母体（官能团），对环上原子依次进行编号；把位次最低的（一般是1号位）取代基定为“对照基团”；其他位置的取代基，根据次序规则，判断其较优（大）基团与对照基团的立体关系；较优（大）基团与对照基团在同一侧的为“*c*”（*cis*），两侧的为“*t*”（*trans*）。此规则与SCIFINDER数据库检索的结果一致，对于二取代的环状异构体构型命名SCIFINDER数据库检索到的名称相对简单（缺少的对照基团）。但是，对于多取代（超过二取代）的环状异构体构型命名，必须采用《有机化合物命名原则2017》，也是IUPAC-2013建议中文命名采用的法则。例如以下四个不同的四取代环状异构体（1和4号位不是手性碳），可以采用课堂提问的方式，增强师生互动，给出各自的构型标识。SCIFINDER数据库中未检索到相关类似化合物的命名，如图12。

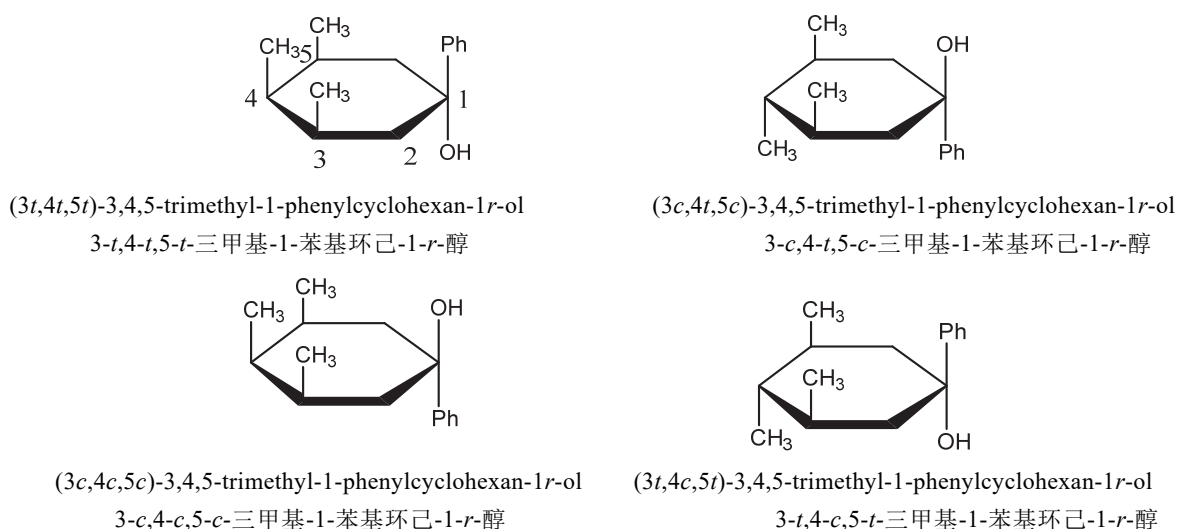


图12 四取代环状异构体结构命名比较

所以，采用《有机化合物命名原则2017》对照基团的方法，无论命名这类二取代，还是多取代具有构型、但没有相同基团的化合物，方法很简单、很实用也很明了。

3.4 归纳总结

通过以上的网络和文献调研，教师归纳总结该类化合物的构型命名规则：对于不含有手性中心、且不含有相同基团多取代具有构型的环状化合物，是结合对映异构体（*Z/E*）命名法的次序规则（判断基团大小）和顺反异构体命名法的顺反规则（同侧或两侧）确定其构型，即：首先选择母体（官能团），对环上原子依次进行编号；把位次最低的（一般是1号位）取代基定为“对照基团”；根据次序规则，依次判断其较优（大）基团与对照基团的立体关系；较优（大）基团与对照基团在同一侧的定义为“*c*”（*cis*），两侧的定义为“*t*”（*trans*）。

4 结语

综上，对于大学有机化学“具有构型的环状化合物异构体命名规则”教学中，可以设计为两个方面教学重点：一是对于有手性中心的化合物，为准确定义其构型，最好采用（*R/S*）系统命名法；二是对于没有手性中心但具有构型的化合物，首先建立参照基团（*r*），再结合次序规则，采用顺反（*c/s*）命名法。本教学设计不但有利于学生全面、系统地掌握“具有构型的环状化合物异构体命名规则”，还可为“具有构型但不含有手性中心且不含有相同基团环状异构体”的命名提供借鉴，填补有机化

学相关教材该类化合物命名规则的空白。同时,通过本课堂教学设计,可以建立学生掌握知识的全面性、系统性观念;还可以通过线上网络和文献调研的教学方法,培养学生课堂教学的信息素养。

参 考 文 献

- [1] 曾昭琼, 李景宁. 有机化学. 第4版. 北京: 高等教育出版社, 2004: 102–103.
- [2] 薛思佳. 有机化学. 第1版. 北京: 科学出版社, 2008: 45–48.
- [3] 胡宏纹. 有机化学. 第2版. 北京: 高等教育出版社, 1990: 39–40.
- [4] 邢其毅, 徐瑞秋, 周政, 裴伟伟. 基础有机化学. 第2版. 北京: 高等教育出版社, 1993: 66–67.
- [5] 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, 2017: 296–297.
- [6] Johnstone, R. A. W.; Quan, P. M. *J. Chem. Soc.* **1963**, 2221.
- [7] Eliel, E. L.; Manoharan, M. *J. Org. Chem.* **1981**, *46* (9), 1959.
- [8] Curtin, D. Y.; Harder, R. J. *J. Am. Chem. Soc.*, **1960**, *82*, 2357.
- [9] Ismailov, A. G.; Gashimov, G. A.; Rustamov, M. A. *Azerb. Khim. Zh.* **1979**, *6*, 58.
- [10] Effenberger, F.; Roos, J.; Kobler, C.; Buhler, H. *Can. J. Chem.* **2002**, *80* (6), 671.