

有機化合物の名称

過去：いろいろな名前（慣用名） ⇒⇒ 現在：統一（世界共通の言語とも言うべきもの）

（例） $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{16}\text{COOH}$

ステアリン酸 stearic acid

ヘプタデカンカルボン酸 heptadecanecarboxylic acid

オクタデカン酸 octadecanoic acid

IUPAC（アイユーパック）命名法

International Union of Pure and Applied Chemistry：国際純正・応用化学連合

- （1）構造の分かった化合物に対して、なるべく簡単でしかも一意的にその構造を表わすことができるように名称を決める。
- （2）構造を表わす名称：系統名（systematic name）
 - （a）全ての有機化合物の母体炭化水素（複素環）を考える
一意的に構造を表わす名称を決める。
 - （b）母体炭化水素の水素原子と置き換わった原子または原子団
……置換基（substituent）という
このうち、その化合物の反応性や性質を示す原子または原子団
……特性基（characteristic group）という
例：ハロゲン、-OH、=O、-COOH など
母体化合物名の前に接頭語、あるいは後に接尾語として示される
 - （c）IUPAC 規則制定前から広く使われている慣用名（trivial name）のうち、比較的簡単な基本的化合物の名前は使用可
例：トルエン（toluene）、キシレン（xylene） など
- （3）2つの命名法
 - （a）置換命名法（substitutive nomenclature）：
炭化水素（または複素環系）の水素原子を特性基で置換したことを表わす命名法
例： $\text{CH}_4 \Rightarrow \text{CH}_3\text{-H} \Rightarrow \text{HをXで置き換える} \Rightarrow \text{CH}_3\text{-X}$
 - （b）基官能命名法（radicofunctional nomenclature）
炭化水素（または複素環系）から水素原子が失われた基（遊離基、ラジカル）と官能基としての特性基が結合して化合物ができていることを示す命名法
例： CH_4 からHが失われる $\Rightarrow \text{CH}_3$ ラジカル $\Rightarrow \text{Xと結合する} \Rightarrow \text{CH}_3\text{-X}$

I. 炭化水素の命名法

I-1. 脂肪族炭化水素

(1) 母体名を選ぶ [直鎖状 (normal) アルカン]

分子内で炭素原子が最も長く連続してつながっているところが脂肪族炭化水素の母体名の基礎

- ・ 名前のつけ方：“語幹 + ane”
- ・ 語幹：鎖の中の炭素原子の数……ギリシャ語由来

例： $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3 \Rightarrow \text{C-C-C-C-C} \Rightarrow 5 \text{ 個の炭素} \Rightarrow \text{語幹は 'pent'}$
 $\Rightarrow \text{“penta + ane”} \Rightarrow \text{“pentane”}$

直鎖状アルカンの語幹とその名称

炭素原子数	語幹	アルカン名称	炭素原子数	語幹	アルカン名称
1	metha	methane	22	docosa	docosane
2	etha	ethane	23	tricoso	tricosane
3	propa	propane	24	tetracosa	tetracosane
4	buta	butane	25	pentacosa	pentacosane
5	penta	pentane	26	hexacosa	hexacosane
6	hexa	hexane	27	heptacosa	heptacosane
7	hepta	heptane	28	octacosa	octacosane
8	octa	octane	29	nonacosa	nonacosane
9	nona	nonane	30	triaconta	triacontane
10	deca	decane	31	hentriaconta	hentriacontane
11	undeca	undecane	32	dotriaconta	dotriacontane
12	dodeca	dodecane	33	tritriaconta	tritriacontane
13	trideca	tridecane	40	tetraconta	tetracontane
14	tetradeca	tetradecane	50	pentaconta	pentacontane
15	pentadeca	pentadecane	60	hexaconta	hexacontane
16	hexadeca	hexadecane	70	heptaconta	heptacontane
17	heptadeca	heptadecane	80	octaconta	octacontane
18	octadeca	octadecane	90	nonaconta	nonacontane
19	nonadeca	nonadecane	100	hecta	hectane
20	icosa	icosane	132	dotriacontahecta	dotriacontahectane
21	henicosa	henicosane	200	dicta	dictane

語尾が母音で始まる時には、語幹の末尾の母音を省略する

例： hexa + ane \Rightarrow hexane (×hexaane)

(2) 環状炭化水素 (cycloalkane)

環状構造であることを指定するために、第1番目の接頭語 (語頭) "cyclo-"を母体名の直前に置く

例：母体が C_6 の環状アルカンがシクロヘキサン (cyclohexane) と命名する

(3) 分枝炭化水素 (branched hydrocarbon)

(a) 第2番目の接頭語は、母体鎖に結合している側鎖基の構造を指定

(b) 側鎖の構造が炭化水素基の時：

母体の語幹に"-yl"を付けてその基を命名 (alkane \Rightarrow alkyl)

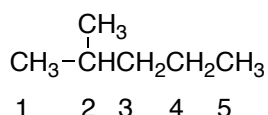
例： CH_3- \Rightarrow metha + yl \Rightarrow methyl (\times methayl)

CH_3CH_2- \Rightarrow etha + yl \Rightarrow ethyl (\times ethayl)

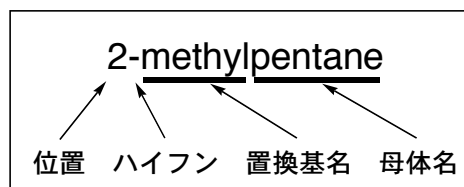
(c) 側鎖基の結合位置：

その基が結合している原子に、できるだけ小さな番号がつくように、母体鎖の片方の端から番号を付けて示す

例：



2-methylpentane (2-メチルペンタン)
4-methylpentaneではない



(d) 同一の側鎖がいくつかある場合：その数を示す数詞を付けて表わす

数詞

炭化水素名に用いたり、倍数接頭語として用いる基本数詞							
1	mono- or hen-	10	deca-	100	hecta-	1000	kilia-
2	di- or do-	20	icosa-	200	dicta-	2000	dilia-
3	tri-	30	triaconta-	300	tricta-	3000	trilia-
4	tetra-	40	tetraconta-	400	tetracta-	4000	tetralia-
5	penta-	50	pentaconta-	500	pentacta-	5000	pentalia-
6	hexa-	60	hexaconta-	600	hexacta-	6000	hexalia-
7	hepta-	70	heptaconta-	700	heptacta-	7000	heptalia-
8	octa-	80	octaconta-	800	octacta-	8000	octalia-
9	nona-	90	nonaconta-	900	nonacta-	9000	nonalia-
上記以外の数詞は、上記の数詞を桁の逆順に組み合わせて作る							
例	468	<u>octahexacontatetracta</u> 8 60 400					
数詞 1, 2 は、単独の場合は mono, di とするが、他の数詞と一緒に時には hen-, do- とする							
例 monochloro \rightarrow hencosachloro、 dichloro \rightarrow dodecachloro							

I-2. オレフィン、アルケンとシクロアルケン (Olefin, Alkene, Cycloalkene)

(1) アルケンの母体名： 語幹 + ene

例： $\text{CH}_2=\text{CH}_2 \Rightarrow \text{etha} + \text{ene} \Rightarrow \text{ethene (ethylene)}$

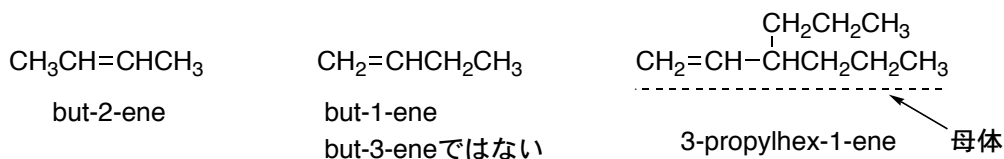
(語尾が母音で始まる時には、語幹の末尾の母音を省略する)

(2) アルケンの母体名の基礎：二重結合を含む最長の炭素鎖

(3) 二重結合の位置を示す番号：

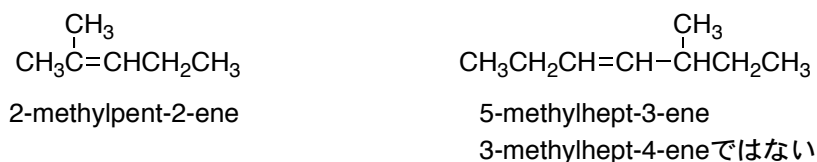
その $\text{C}=\text{C}$ ができるだけ小さな番号になるように末端から母体鎖に番号を付ける

例：



(4) 基準となる母体名を優先

例：



(5) シクロアルケン：

二重結合の片方が番号1、もう一方が番号2

したがって、二重結合の位置を指定する番号1は不要

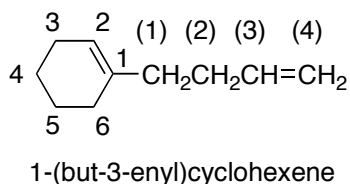
例：

(6) 側鎖に $\text{C}=\text{C}$ がある時：

置換基名の語尾はエニル “-enyl (ene + yl)” になる

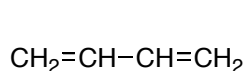
側鎖の番号は、それが母体鎖に結合しているところから始まる

例：

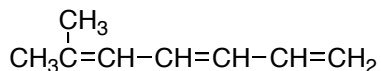


(7) 2個以上の C=C がある時： -diene、 -triene、 -tetraene、 ……

例：



buta-1,3-diene



6-methylhepta-1,3,5-triene

2-methylhepta-2,4,6-trieneではない

I-3. アルキン (Alkyne)

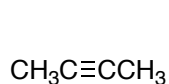
(1) アルキンの母体名： 語幹 + yne

例： $\text{CH}\equiv\text{CH} \Rightarrow \text{etha} + \text{yne} \Rightarrow \text{ethyne}$ (エチン、acetylene)

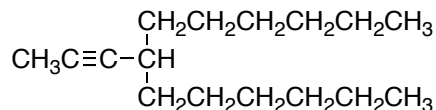
(語尾が y で始まる時には、語幹の末尾の母音を省略する)

(2) 三重結合 $\text{C}\equiv\text{C}$ を含む最長の炭素鎖がアルキンの母体

例：



but-2-yne



4-hexyldec-2-yne

(3) 二重結合と三重結合の両方が存在する時

(a) 語尾は “enyne (ene + yne)”

(b) 二重結合および三重結合ができるだけ小さな番号になるように

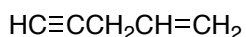
(c) どちらの不飽和基にも同じ番号を付けうる時：“-ene”の方に小さな番号

例：



pent-3-en-1-yne

pent-2-en-4-yneではない



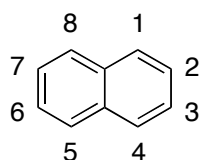
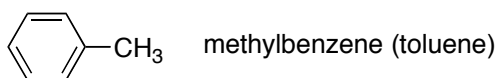
pent-1-en-4-yne

pent-4-en-1-yneではない

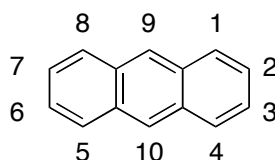
I-4. 芳香族炭化水素 (Aromatic hydrocarbon、Arene)

(1) ベンゼンまたは関連した母体構造の誘導体として命名

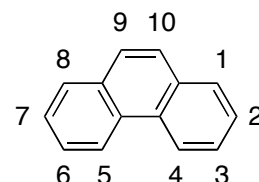
例：



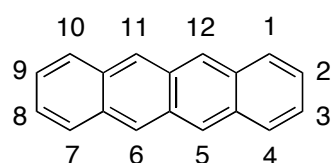
naphthalene



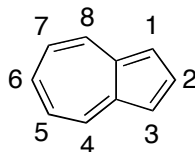
anthracene



phenanthrene



tetracene



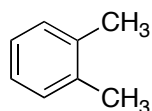
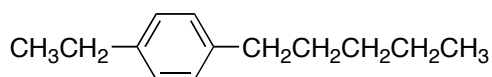
azulene

番号 9, 10 の位置に注意！

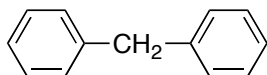
(2) 2個の置換基がベンゼン環に結合している時：

(a) 両置換基が 1,2-の関係 → *ortho* (オルト) → *o*-(b) 両置換基が 1,3-の関係 → *meta* (メタ) → *m*-(c) 両置換基が 1,4-の関係 → *para* (パラ) → *p*-

例：

1,2-dimethylbenzene
(*o*-dimethylbenzene)1-ethyl-4-pentylbenzene
(*p*-ethylpentylbenzene)(3) ベンゼンから水素 1 個を取り去った置換基 (C₆H₅-) : phenyl- (フェニル)

例：



diphenylmethane

I I. 官能基を含む化合物の命名法

I I-1. アルコール、フェノール、チオール

- (1) アルコールがその機能を発揮する部分は、アルキル基に結合しているヒドロキシ基である

アルコール： R-OH、 ヒドロキシ基： hydroxy group

(注：ヒドロキシ基に対して水酸基という語は使わない)

- (2) ヒドロキシ基が結合している炭素鎖から母体鎖を選ぶ

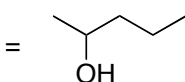
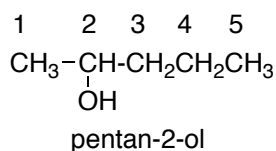
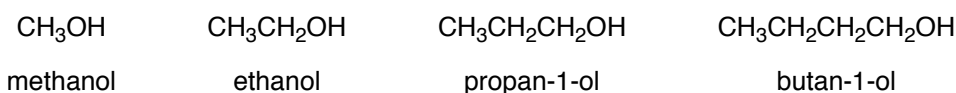
母体鎖は最長になるように選ぶが、環系や多重結合があればそちらが優先

番号：ヒドロキシ基ができるだけ小さな数になるように、炭素母体鎖の端から

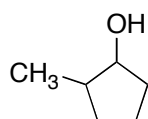
- (3) アルコールは語尾 "-ol" によって指定

(語尾が母音で始まる時には、語幹の末尾の母音を省略する)

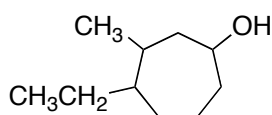
例：



- 1) 母体名の語幹：pentane
- 2) pentane + ol = pentanol (×pentaneol)
- 3) ヒドロキシ基の位置番号は2



2-methylcyclopentanol



4-ethyl-3-methylcycloheptanol

- (4) ヒドロキシ基を2個以上含む化合物：

語尾はそれぞれ、-diol (2つ)、-triol (3つ)、-tetraol (4つ)、-polyol (多数)

例： $\text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ ethane-1,2-diol

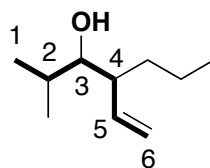
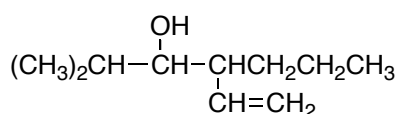
注意：ethan-1,2-diol ではない！

(語尾が子音から始まるので、語幹の末尾の母音は省略されない)

- (5) ヒドロキシ基以外にも官能基のある場合

ヒドロキシ基の方が他の官能基より優先順位の高い場合……語尾“-ol”で命名

例： $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{OH}$ prop-2-en-1-ol

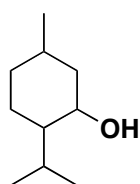


2-methyl-4-propylhex-5-en-3-ol

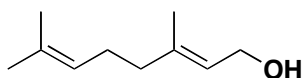
5-methyl-3-propylhex-1-en-4-olではない

(6) 天然物の多くは慣用名

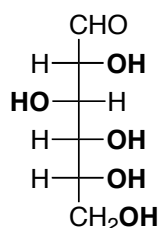
例：



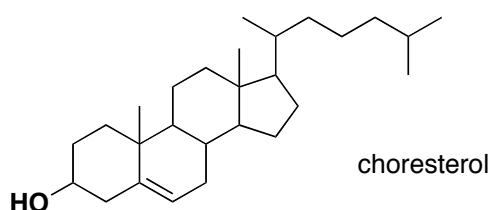
menthol



geraniol



glucose

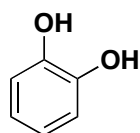
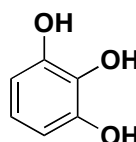


cholesterol

(7) ベンゼンおよび他の芳香族炭素環化合物のヒドロキシ誘導体

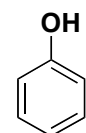
母体炭化水素名 + “-ol”, “-diol” など

例：

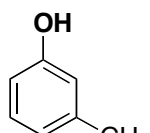
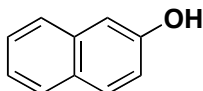
benzene-1,2-diol
(catechol)
benzen-1,2-diolではないbenzene-1,2,3-triol
(pyrogallol)
benzen-1,2,3-triolではない

(8) 多くの慣用名が使われる

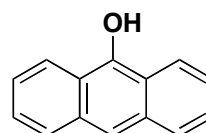
例：



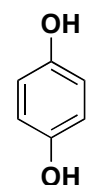
phenol

*m*-cresol

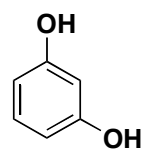
2-naphthol



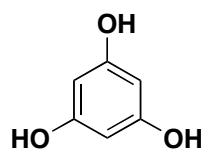
9-anthrol



hydroquinone

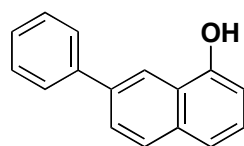


resorcinol

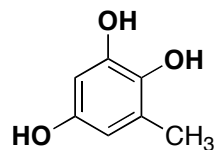


phloroglucinol

命名例



7-phenyl-1-naphthol



6-methylbenzene-1,2,4-triol

(9) チオール：アルコールの -OH が -SH に置き換わったもの

(a) 語尾名 “-thiol” を付ける

例： CH_3SH methanethiol (×methanthiol)

(語尾が子音から始まるので、語幹の末尾の母音は省略されない)

$(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{CH}_2\text{SH}$ 3-methylbutane-1-thiol スカンクの放出する臭い

$\text{CH}_2=\text{CHCH}_2\text{SH}$ prop-2-ene-1-thiol ニンニクの臭い

(b) 基 -SH の名称は sulfanyl- とし、mercapto- は廃止

例： $\text{HS-CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ 2-sulfanylethanol (×2-mercaptoethanol)

(c) 基官能命名法 (R 命名法) の場合

hydrosulfide (ヒドロスルフィド) を用い、mercaptan (メルカプタン) は廃止

例： CH_3SH methyl hydrosulfide (×methyl mercaptan)

I I-2. エーテルとスルフィド (チオエーテルという呼び名は廃止)

(1) 3通りの命名法がある

例： $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{CH}_3$ (a) methoxyethane 置換命名法 (S 命名法)

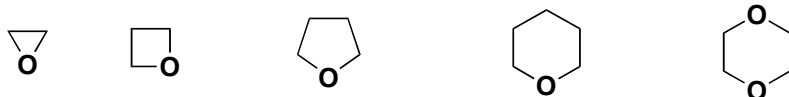
(b) ethyl methyl ether 基官能命名法 (R 命名法)

(c) 2-oxabutane “oxa” という表現 (“a” 命名法)

(2) 環状エーテル：含酸素複素環

複素環：環状構造の中に炭素以外の原子がある場合

例：



oxirane oxetane tetrahydrofuran tetrahydropyran 1,4-dioxane

(3) スルフィド

4通りの命名法がある

例： $\text{CH}_3\text{SCH}_2\text{CH}_3$ (a) methylsulfanylethane 置換命名法 (S 命名法)

(b) ethyl methyl sulfide 基官能命名法 (R 命名法)

(c) 2-thiabutane “thia” という表現 (“a” 命名法)

(d) ethyl(methyl)sulfane

置換命名法で母体水素化物 sulfane による命名法

H-S-H sulfane

-SH sulfanyl-

-S- sulfanediyl-

I I-3. アミン

(1) アミンはアンモニア (アザン) の有機誘導体と考える

第1級アミン: primary amine $R-NH_2$

第2級アミン: secondary amine R^1R^2NH

第3級アミン: tertiary amine $R^1R^2R^3N$

第4級アンモニウム塩: quaternary ammonium salt $R^1R^2R^3R^4N^+ X^-$

(アルコールの第1級、第2級、第3級とは違うことに注意せよ)

(2) 3通りの命名法がある (いずれも置換命名法 (S法))

(a)法: 基名 R + 接尾語 (-amine)

$CH_3CH_2NH_2 \Rightarrow$ ethyl + amine \Rightarrow ethylamine

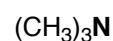
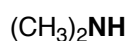
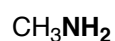
(b)法: 母体炭化水素名 + 接尾語 (-amine)

$CH_3CH_2NH_2 \Rightarrow$ ethane + amine \Rightarrow ethanamine (\times ethaneamine)

(c)法: 基名 R + 接尾語 (-azane)

$CH_3CH_2NH_2 \Rightarrow$ ethyl + azane \Rightarrow ethylazane

例:



(a)法 methylamine

(a)法 dimethylamine

(a)法 trimethylamine

(b)法 methanamine

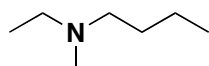
(b)法 *N*-methylmethanamine

(b)法 *N,N*-dimethylmethanamine



(a)法 1-methylethylamine または propan-2-ylamine

(b)法 1-methylethanamine または propan-2-amine



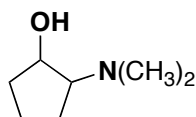
(a)法 butyl(ethyl)methylamine または *N*-ethyl-*N*-methylbutylamine

(b)法 *N*-ethyl-*N*-methylbutan-1-amine

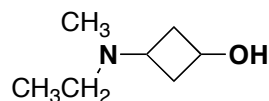
(3) アミンが母体分子上の置換基である場合

接頭語 “amino-” または “alkylamino-” をつける

例:



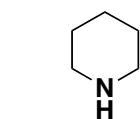
2-(*N,N*-dimethylamino)cyclopentanol



3-(*N*-ethyl-*N*-methylamino)cyclobutanol

(4) “aza” を用いる命名

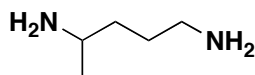
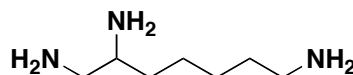
例：

azacyclohexane
piperidine1,2-diazacyclopentane
pyrazolidineazabenzene
pyridine

(5) 分子内に 2 個以上のアミノ基がある場合

語尾はそれぞれ、-diamine (2つ)、-triamine (3つ)、-tetramine (4つ)

例：

(a)法 pentane-1,4-diyldiamine
(b)法 pentane-1,4-diamine(a)法 heptane-1,2,7-triamine
(b)法 heptane-1,2,7-triamine

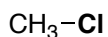
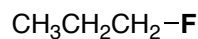
I I-4. 有機ハロゲン化物

(1) ハロゲンを表わす語尾はないので、置換炭化水素として命名する

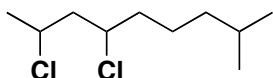
(2) ハロゲン化物 (alkyl halide) と (R 命名法で) 称されるが、用語の意味のようにイオン性ではない

(3) F : fluoro-, Cl : chloro-, Br : bromo-, I : iodo-

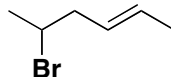
例：

chloromethane
(methyl chloride)

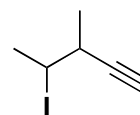
1-fluoropropane



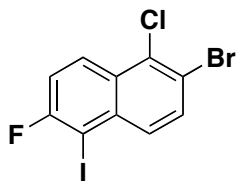
2,4-dichloro-8-methylnonane



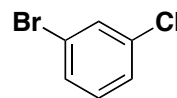
5-bromohex-2-ene



4-iodo-3-methylpent-1-yne

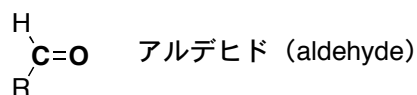
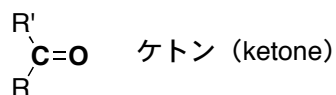


2-bromo-1-chloro-6-fluoro-5-iodonaphthalene



1-bromo-3-chlorobenzene

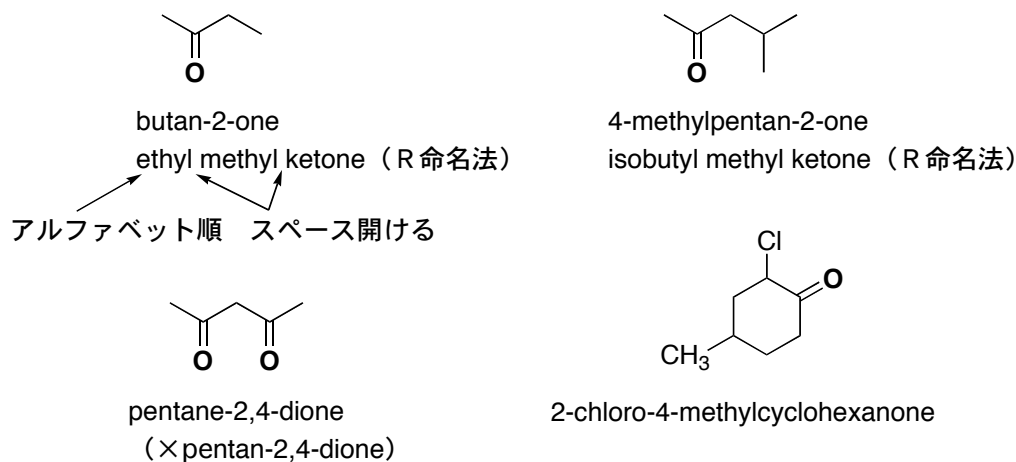
I I-5. ケトンおよびアルデヒド



(1) ケトン

- (a) 語尾に“-one”を用いる
- (b) カルボニル基の位置番号を指定する
- (c) R命名法ではカルボニル基に結合している2個の炭化水素基を置換基として命名する
- (d) ケトンはこれまでに登場した官能基のうち最優先

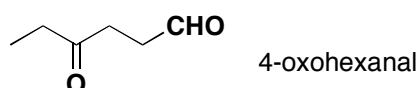
例：



(2) ケトンより優先する官能基のある場合：

官能基名として“oxo-”という接頭語を用いる

例：



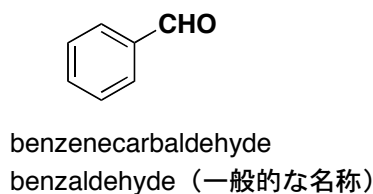
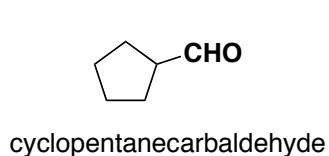
(3) アルデヒド

- (a) 語尾に“-al”を用いる
- (b) アルデヒドは炭素鎖の末端にしかないので位置番号不要

例： $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CHO}$ hexanal

(4) CHOが環に直結している時：語尾に“-carbaldehyde”を用いる

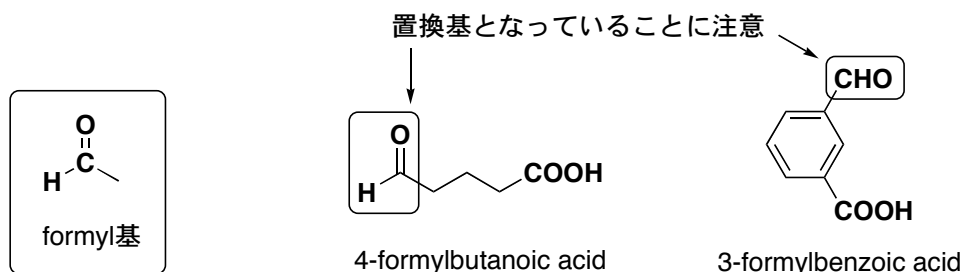
例：



(5) アルデヒドより優先する官能基のある場合：

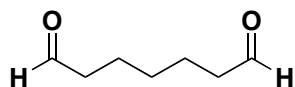
- (a) “formyl-“ あるいは “methanoyl-“ という接頭語を用いる
 (b) “formyl-“ あるいは “methanoyl-“ を用いる場合、(3) と比べて炭素数が1つ減少することに注意する

例：



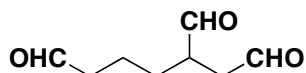
(6) ホルミル基を複数個持つ鎖状アルデヒド

2個：



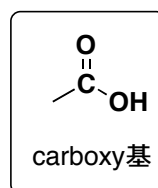
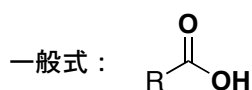
heptane (C7) + di (2個) + al (アルデヒド) \Rightarrow heptanedial

3個以上：



pentane-1,2,5-tricarbaldehyde または 3-formylheptanedial

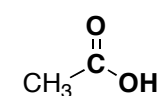
I 1-6. カルボン酸



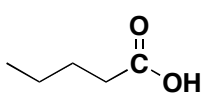
(1) カルボン酸

- (a) 語尾に “-oic acid” を用いる
 (b) 常に炭素鎖の末端であるので、位置番号はない
 (c) 置換基の位置はカルボキシ基の炭素を起点 (1) として定める

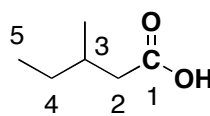
例：



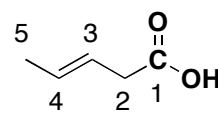
ethanoic acid
acetic acid (慣用名)



pentanoic acid

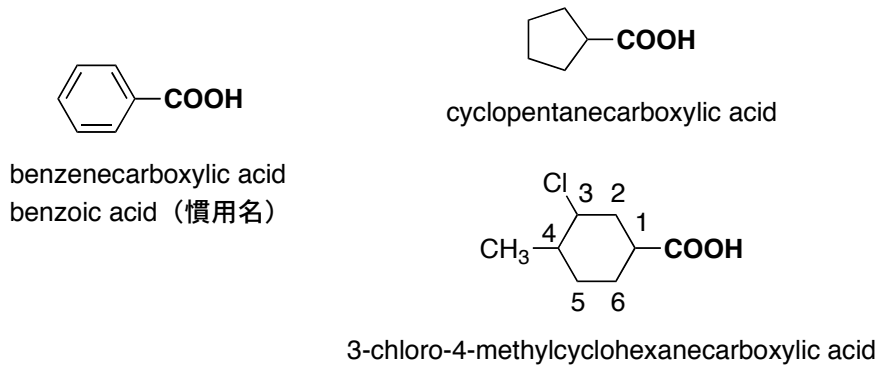


3-methylpentanoic acid

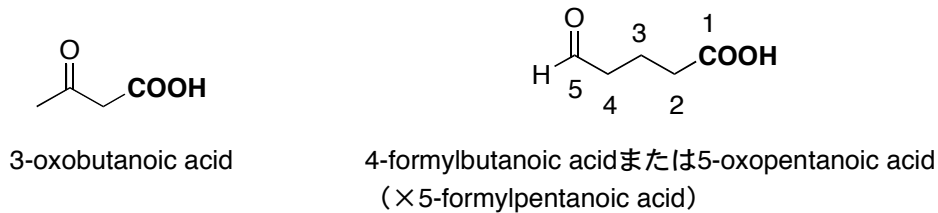


pent-3-enoic acid

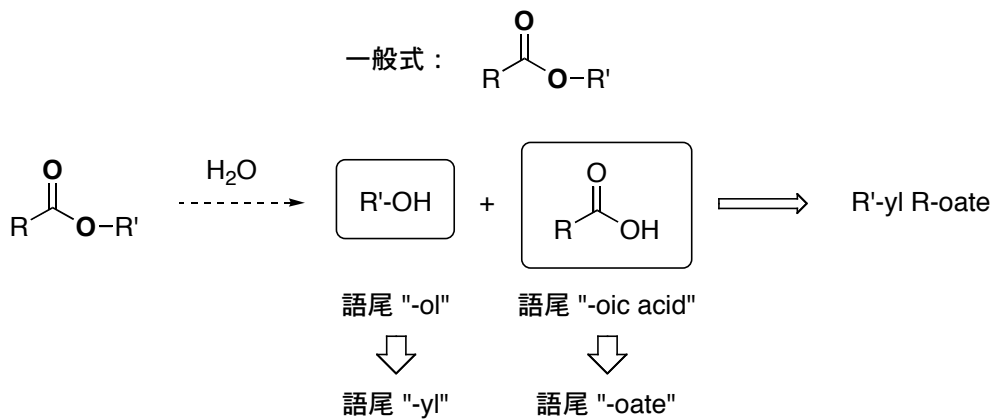
- (2) 環状構造にカルボキシ基がついている場合：語尾に“carboxylic acid”を用いる
例：



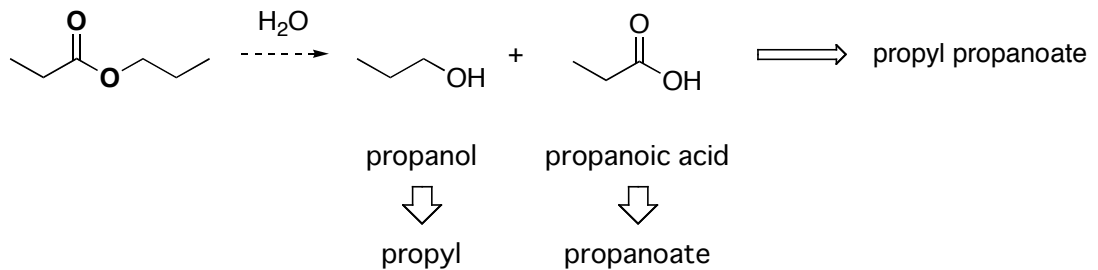
- (3) カルボキシ基はこれまでに登場した官能基のうち最優先
例：



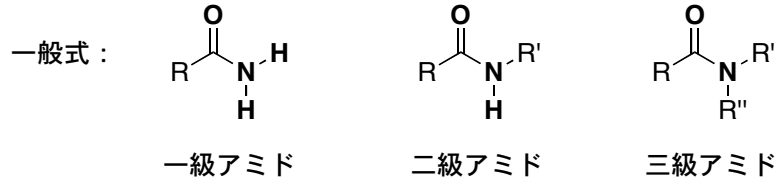
I I-7. カルボン酸エステル



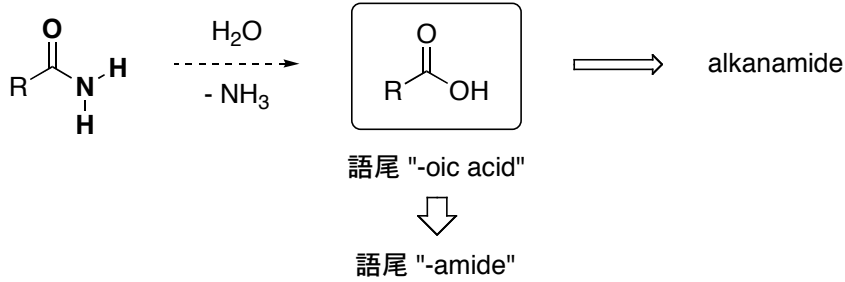
例：



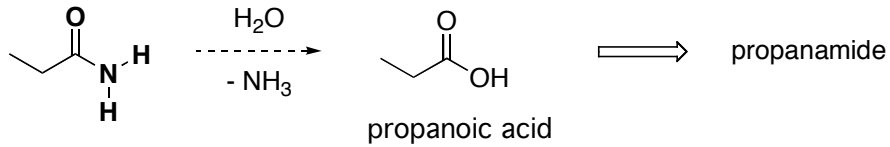
I I-8. カルボン酸アミド



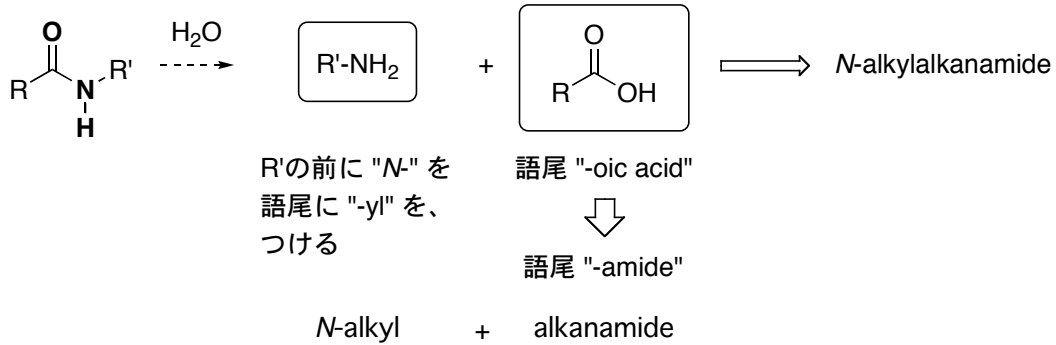
(1) 一級アミドの場合



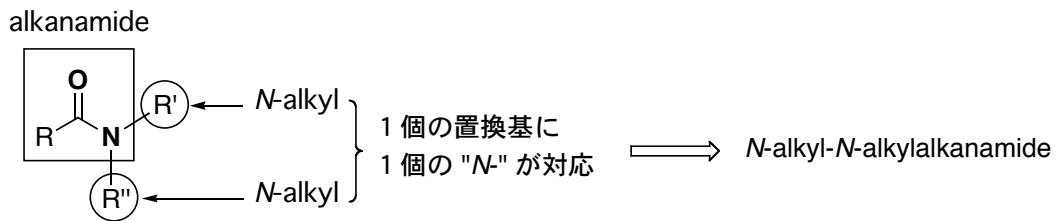
例：



(2) 二級アミドの場合



(3) 三級アミドの場合



例：

