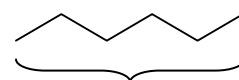


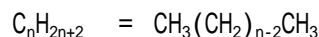
ノナノナコンタノナクタノナリアン! >



9/22 p7 アミンの命名、一部修正

直鎖アルカン (p103 表 3.1)

炭素数 = n (この図は n = 6)



はじめの4種以外は、
アルカン名 = 数詞 + アン

n	alkane	アルカン名	倍数接頭辞 (置換された同一の基の倍数)
1	methane	メタン	mono, hen (mono)
2	ethane	エタン	di, do (bis)
3	propane	プロパン	tri (tris)
4	butane	ブタン	tetra (tetrakis)
5	pentane	ペンタン	penta (pentakis)
6	hexane	ヘキサン	hexa (hexakis)
7	heptane	ヘプタン	hepta :
8	octane	オクタン	octa
9	nonane	ノナン	nona
10	decane	デカン	deca
11	undecane	ウンデカン	un + decane undeca
12	dodecane	ドデカン	do + dodeca
13	tridecane	トリデカン	tri + trideca
14	tetradecane	テトラデカン	tetra + :
15	pentadecane	ペンタデカン	penta +
16	hexadecane	ヘキサデカン	hexa +
17	heptadecane	ヘプタデカン	hepta +
18	octadecane	オクタデカン	octa +
19	nonadecane	ノナデカン	nona +
20	icosane	イコサン	hen + icosane
21	heneicosane	ヘンイコサン	do + cosane
22	docosane	ドコサン	tri +
23	tricosane	トリコサン	tetra +
24	tetracosane	テトラコサン	penta +
25	pentacosane	ペンタコサン	hexa +
26	hexacosane	ヘキサコサン	hepta +
27	heptacosane	ヘプタコサン	octa +
28	octacosane	オクタコサン	nona +
29	nonacosane	ノナコサン	tri + acontane
30	triacontane	トリアコンタン	hen + triacontane
31	hentriacontane	ヘントリアコンタン	do +
32	dotriacontane	ドトリアコンタン	tri +
33	tritriacontane	トリトリアコンタン	tetra +
34	tetratriacontane	テトラトリアコンタン	:
40	tetracontane	テトラコンタン	tetra + (a)contane
50	pentacontane	ペンタコンタン	penta +
60	hexacontane	ヘキサコンタン	hexa +
70	heptacontane	ヘプタコンタン	hepta +
80	octacontane	オクタコンタン	octa +
90	nonacontane	ノナコンタン	nona +
100	hectane	ヘクタン	ヘクト + アン
101	henhectane	ヘンヘクタン	hen +
102	dohectane	ドヘクタン	do +

単独では、1 は mono、2 は di。他の数詞と複合するとき、1 は hen、2 は do とする。

decyl, decene は、デキル、デケンではなく、デシル、デセン。

他と複合するとき、1 は hen だが、11 だけ例外。hendecane ではない。

20 は "icosa" 以外に "eicosa" エイコサを用いることがある (1993 年 IUPAC 以前など)。これらの語頭の "(e)i" は、"hen" 以外の一位の数詞の後で脱落する。

200	dictane	ジクタン	1000 kiliane	キリアン	キロ+アン
300	trictane	トリクタン	2000 diliane	ジリアン	
400	tetractane	テトラクタン	3000 triliane	トリリアン	
500	pentactane	ペンタクタン	4000 tetraliane	テトラリアン	
600	hexactane	ヘキサクタン	5000 pentaliane	ペントリアン	
700	heptactane	ヘプタクタン	6000 hexaliane	ヘキサリアン	
800	octactane	オクタクタン	7000 heptaliane	ヘプタリアン	
900	nonactane	ノナクタン	8000 octaliane	オクタリアン	
			9000 nonaliane	ノナリアン	

複合数詞は小さい桁から組み合わせる。一、十、百、千の桁の該当する数詞(アルカン名語尾の -ane を -e に戻したものを)をこの順で結合する。重複する母音 a を取り去り、-ane を付加する。

例) 111 = un + deca + hecta (-a) + ane = undecahectane (11 の例外を適用。× hendecahectane)

例) 741 = hen + tetraconta + heptacta (-a) + ane = hentetracontaheptactane

例) 1132 = do + triaconta + hecta + kilia (-a) + ane = dotriacontahectakiliane

例) 2567 = hepta + hexaconta + pentacta + dilia (-a) + ane = heptahexacontapentactadiliane

分岐アルカン

アルキル基 (P 109 表 3.2)

アルカンの水素を一つ除いてできる基は, alkane の語尾 -ane を -yl (イル) に換えて alkyl として命名する。このとき水素との結合を均一開裂させて生じる遊離原子価をもつ炭素を位置番号 1 とする。

遊離原子価：遊離基は、ラジカル種を意味する。アルカンにおいて、水素との共有結合が切れるとき、炭素、水素の上に電荷が生じないように共有していた電子を左右均等に切ると、不對電子が生じる。

例 $\text{CH}_3 - \text{H} \quad \text{CH}_3 \cdot + \cdot \text{H}$

単純な直鎖アルキル基の例

- CH_3 メチル基 (meth-ane meth-yl)

- C_2H_5 エチル基 (eth-ane eth-yl)

アルキル基を一般に「R - 」と記すことがある。一部のアルキル基には、よく使われる略号のあるものもある。-Me(メチル基)、-Et(エチル基)など。

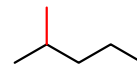
枝分かれをもつアルカンの命名では、右図のように「主鎖」と「側鎖」に分けて考える。側鎖が結合している位置を示す番号は、他に優先すべき事情がない場合は、「数字の組」が小さくなるよう定める。アルキル基に枝分かれがある場合も、同様に命名することができる。(P 83~86)

例 2,4-dimethylpentane の 1 位の水素を除いてできるアルキル基 2,4-dimethylpentyl

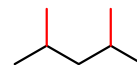
アルカンイル基：ただし、IUPAC 規則 1993 年勧告では、1-methylbutyl 基を、pentan-2-yl 基と表記することが認められた。pent-2-yl や 2-pentyl と表記してはいけない。また、この方法を用いる場合は pentyl 基も、pentan-1-yl 基という表記に統一する必要がある。

枝分かれのある場合：「主鎖」と「側鎖」主鎖中の水素が「側鎖」に置き換わったと考え、「側鎖の位置番号」+「側鎖の名前」+「主鎖」として命名する。

(例) 2-methylpentane



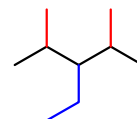
(例) 2,4-dimethylpentane



単純なアルカンでは、最長部分が主鎖。

異なる置換基は、アルファベット順に書く。

(例) 3-ethyl-2,4-dimethylpentane



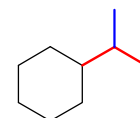
環になっている場合：

環状アルカン = cyclo + alkane

(例) cyclohexane



(例) (1-methylethyl)cyclohexane



数字の組の比較

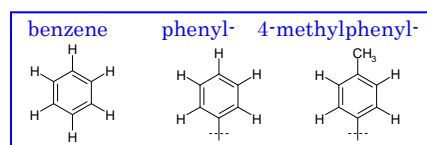
同数からなる数字の組み合わせ ((1,1,10,20) と (2,3,1,5) など) を比較して「小さい組」を決定する場合、それぞれを小さい順にならべ、最初の数同士を比較する。上の例の場合、どちらも 1 で引き分け。その場合、2 番目に小さい数同士を比較する。1 と 2 で最初の組の方が小さいことになる。2 番目で決まらなければ 3 番目を比較、以下同様。逆に「大きい組」を決定する必要がある場合はそれぞれの組内の数字を大きい順に並べて同様に比較する。

命名上、数字の組が小さくなることよりも優先されるべき事情の例

- ・ アルキル基として命名する場合は、その結合の位置が必ず 1 になる。(1993 年の補足での例外、アルカンイル基とする場合では、この限りではない。)
- ・ アルキル基以外の官能基をもつ場合、最も優先される種類の官能基 (主官能基) の結合位置の番号がより小さくなること、そのほかの置換基全体の数字の組を小さくすることよりも優先される。

慣用名

IUPAC による体系的な命名法以外に慣用名が認められているものがある。慣用名については、教科書等に出てくる都度、個々に学ぶこと。ただし、慣用名によっては誘導体を作ってもよいもの (例: phenyl 基は、4-methylphenyl 基とすることができる) と、誘導体を作ってはいけないもの (例: isopropyl 基から 1-bromoisopropyl 基などとしてはいけない) のものがあるので、区別して覚えるようにする。(なお、2013 年勧告では優先 IUPAC 名 (PIN) として使用できる慣用名が大幅に制限されている。たとえば、isopropyl 基も PIN には使用できない。)



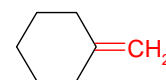
二価、三価アルキル基の命名 (アルキリデン基、アルキリジン基)

アルカンのひとつの炭素から 2 個の水素を除いてできる 2 価の基は、1 価の基名 (アルキル基名) に -idene をつけて命名する。3 価の基は -idyne (イジン) である。

ただし 1993 年勧告では、相手との間に二重結合や三重結合を作らない場合は、alkane-1,1-diyl, alkane-1,1,1-triyl という使い方が推奨される。(相手との間に単結合と二重結合をもつ三価基の場合は、-1-yl-1-ylidene)

また、直鎖アルカンの両端から水素原子 1 個ずつを取り除いてできる基 $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ や $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$ は、ethylene, trimethylene のように命名し、側鎖がある場合は置換基として接頭語をつけることができる。1993 年勧告に従えば、これらはたとえば propane-1,3-diyl などとなる。

$\text{CH}_2=$ は、methyl + idene



methylenecyclohexane

直鎖アルキル基：アルカンの末端の炭素から水素を 1 つ取り除いてできるもの。

alkane alkyl (語尾の -ane が -yl) $-\text{C}_n\text{H}_{2n+1}$, $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{n-2}\text{CH}_2-$

アルキリデン基：アルカンの末端の同一の炭素から水素を 2 つ取り除いてできるもの。

alkane alkylidene (alkyl + id + ene) $=\text{C}_n\text{H}_{2n}$, $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{n-2}\text{CH} =$

アルキリジン基：アルカンの末端の同一の炭素から水素を 3 つ取り除いてできるもの。

alkane alkylidyne (alkyl + id + yne) $\text{C}_n\text{H}_{2n-1}$, $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{n-2}\text{C}$

n	alkyl	アルキル	alkylidene	アルキリデン	alkylidyne	アルキリジン
1	methyl	メチル	methylidene (methylene)	メチリデン メチレン*	methylidyne (methine)	メチリジン メチン*
2	ethyl	エチル	ethylidene	エチリデン	ethylidyne	エチリジン
3	propyl	プロピル	propylidene	プロピリデン	propylidyne	プロピリジン
4	butyl	ブチル	butylidene	ブチリデン	butylidyne	ブチリジン

アルキル基

- $\text{CH}=\text{CH}_2$ vinyl ビニル*
 - $\text{CH}_2\text{C}_6\text{H}_5$ benzyl ベンジル*
 - $\text{CH}(\text{CH}_3)_2$ isopropyl イソプロピル*

アルキリデン基

= $\text{C}=\text{CH}_2$ vinylidene ビニリデン*
 = CHC_6H_5 benzylidene ベンジリデン*
 = $\text{C}(\text{CH}_3)_2$ isopropylidene イソプロピリデン*

* メチレン、メチン、ビニル、ベンジル、イソプロピル等は、慣用名。

官能基をもつ化合物 (ここでは短縮構造式で示した。教科書後ろ見開きの構造を参照すること。)

複数の種類の官能基を含む化合物の場合、次表の下方ほど主官能基(接尾語で命名する)の優先度が高い。最も優先度の高い官能基を主基とし、接尾語を用いる。それ以外の官能基は、接頭語を用いて置換基とする。優先度の最も高い基(主基)が非環状鎖の一部である場合は、主官能基の数が最大になる最も長い炭素鎖を母体として選ぶ。主官能基が環に付いていれば母体としてその環系を用いる。

官能基の構造と命名 :		母体としての命名時に使用。	側鎖としての命名時に使用。	必要に応じ、位置番号をつける。	側鎖として命名 -F fluoro -Cl chloro -Br bromo -I iodo アニオンとしての命名時は、 -o -ide 例: chloride
一般名	一般形	接尾語	接頭語	例(名称)	
alkane	R - H	-ane	alkyl -	CH ₃ CH ₂ CH ₃ (propane)	
alkene		-ene		CH ₃ CH=CH ₂ (propene)	
alkyne		-yne		CH ₃ C≡CH (propyne)	
halide	R - X		halogeno -	CH ₃ CH ₂ CH ₂ Cl (1-chloropropane)	
ether	R - O - R'		alkyloxy -	C ₆ H ₅ OCH ₃ (methoxybenzene) (methoxy は methyloxy の短縮名)	
sulfide	R - S - R'		alkylsulfanyl -	C ₆ H ₅ SCH ₃ ((methylsulfanyl)benzene)	
arene	Ar - H			C ₆ H ₆ (benzene)	
-----	R - NO ₂		nitro -	CH ₃ CH ₂ CH ₂ NO ₂ (1-nitropropane)	
amine	R - NH ₂	-amine	amino -	CH ₃ CH ₂ CH ₂ NH ₂ (propan-1-amine)	
thiol ***	R - SH	-thiol	sulfanyl -	CH ₃ CH ₂ CH ₂ SH (propane-1-thiol)	
alcohol	R - OH	-ol	hydroxy -	CH ₃ CH ₂ CH ₂ OH (propan-1-ol)	
ketone	R - CO - R'	-one	oxo -	CH ₃ C(=O)CH ₃ (propan-2-one)	
aldehyde	R - CHO	-carbaldehyde	formyl -	C ₆ H ₅ CHO (benzenecarbaldehyde)	
	R - CHO *	-al	oxo -	CH ₃ CH ₂ CHO (propanal)	
nitrile	R - CN	-carbonitrile	cyano -	C ₆ H ₅ CN (benzenecarbonitrile)	
	R - CN *	-nitrile		CH ₃ CH ₂ CN (propanenitrile)	
amide	R - CONH ₂	-carboxamide	carbamoyl -	C ₆ H ₅ CONH ₂ (benzenecarboxamide)	
	R - CONH ₂ *	-amide		CH ₃ CH ₂ CONH ₂ (propanamide)	
carboxylic acid halide	R - COX	-carbonyl halide	halocarbonyl -	C ₆ H ₅ COCl (benzenecarbonyl chloride)	
	R - COX *	-oyl halide		CH ₃ COCl (ethanoyl chloride)	
ester **	R - CO ₂ R'	-carboxylate	alkoxycarbonyl -	C ₆ H ₅ CO ₂ CH ₃ (methyl benzenecarboxylate)	
	R - CO ₂ R' *	-oate		CH ₃ CO ₂ C ₂ H ₅ (ethyl ethanoate)	
carboxylic acid anhydride **	(RCO) ₂ O	-carboxylic anhydride		(C ₆ H ₅ CO) ₂ O (benzenecarboxylic anhydride)	
	(RCO) ₂ O *	-oic anhydride		(CH ₃ CO) ₂ O (ethanoic anhydride)	
carboxylic acid	RCO ₂ H	-carboxylic acid	carboxy -	C ₆ H ₅ CO ₂ H (benzenecarboxylic acid)	
	RCO ₂ H *	-oic acid		CH ₃ CO ₂ H (ethanoic acid)	

R-, R'- はアルキル基 (アルカンから水素をひとつ除いたもの)。Ar- はアリル基 (芳香族化合物 arene (アレーン) より水素を除いたもの)。

フェニル基 Ph- は、C₆H₅-のことで、ベンゼンより水素をひとつ除いた基)。

* 母体が鎖状の化合物では、**青字で示した炭素**が官能基の一部であるが、主鎖の炭素として数える。母体が環状のものである場合と、母体が鎖状で官能基中の炭素も含めて数える場合、接尾語が異なる。

例 C₆H₅-CHO (benzene + **carbaldehyde**) では、ホルミル基中の炭素は、benzene に含まれない。
CH₃CH₂-CHO (propan + **al**) では、ホルミル基中の炭素は、主鎖 propane の部分に含まれる。

** エステル、酸無水物

エステルは2価の官能基であるが、左右(カルボン酸側、アルコール側)が非対称なので注意すること。アルキル基名 + 種類名(オアート)で、間には空白文字(スペース)が入る。

例 CH₃CO₂CH₃ **methyl** ethanoate, **methyl** acetate

なお、アルキル基名なしの -oate, -carboxylate はカルボン酸に由来するアニオン(RCO₂⁻)を表す。

例 CH₃CO₂Na **sodium** ethanoate, **sodium** acetate, NaCl sodium chloride

ジカルボン酸のうち一方のみがエステルになっているような化合物(ハーフエステル、部分エステル)の場合、「エステル基をもつカルボン酸」としても命名できるが、部分エステルとして命名する場合は、アルキル基名 + 種類名(オアート)の間に hydrogen 水素 をおく。

例 HO₂CCH₂CH₂CO₂Et ethyl hydrogen succinate, ethyl hydrogen butanedioate

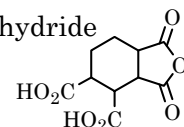
対称な酸無水物(同じ種類のカルボン酸2分子から脱水縮合したもの)は、酸の名称の acid を種類名 anhydride 無水物 に代えて命名する。非対称な酸無水物(異なる2種類の酸から誘導される混合無水物)は、2つの酸名の形容詞をアルファベット順にならべ、種類名 anhydride 酸無水物 を添えて命名する。ジ(またはそれ以上の)カルボン酸が分子内の脱水によって生じる環状の酸無水物は、対応するカルボン酸の名称の acid を種類名 anhydride 無水物に代えて命名する。

なお、acetic anhydride は、無水酢酸、または 酢酸無水物。水を含まない純水な酢酸は「無水酢酸」とは言わない。(氷酢酸という慣用的な呼称がある。)

例 (CH₃CO)₂O ethanoic anhydride, acetic anhydride

例 CH₃C(=O)OC(=O)Ph benzenecarboxylic ethanoic anhydride, acetic benzoic anhydride

例 右図 cyclohexane-1,2,3,4-tetracarboxylic acid 3,4-anhydride



*** チオール thiol は、スルファニル基(-SH)を持つ化合物のことである。スルファニル基は、IUPAC1993 以前(IUPAC1979)では、メルカプト基(mercapto)と命名された。そのため、チオールはメルカプタンと呼ばれることがある。

例 CH₃CH₂-SH (ethanethiol) 旧名称 ethyl mercaptane

例 CH₃CH(SH)CH(OH)CH₃ (3-sulfanylbutan-2-ol) 旧名称 3-mercapto-2-butanol

命名法(補完)**優先 IUPAC 名 (preferred IUPAC name, PIN) と一般 IUPAC 名 (general IUPAC name)**

2013 年勧告では、1つの構造にはなるべく1つの名称を用いることが望ましいという理念から、優先的に使用することが推奨される PIN が提唱された。PIN の命名規則の基本は、「置換命名法」である。その他に、これまでの命名規則に準拠した GIN も使用が認められる。

例えば、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ の PIN は「置換命名法」による ethanol である。この他に「官能種類命名法」による命名 ethyl alcohol も GIN として認められる。その他にもいくつかの命名法の体系がある。

[慣用名 (common name)] : methane, ethane, propane, butane, benzene, phenol, glucose...

統一的な規則に則って定められていないもの。

IUPAC では、一部の化合物に対し、慣用名の使用を認めている。ただし、2013 勧告では、優先 IUPAC 名としては、慣用名が大幅に制限され、その多くが使用できないこととなった。

例) 優先 IUPAC 名において、「acetone」の使用は認められない。

例) 優先 IUPAC 名において、枝分かれのあるアルキル基の慣用名としては、*tert*-butyl 基のみが許容。isopropyl 基、*sec*-butyl 基等はいずれも認められない。

優先 IUPAC 名で許容される慣用名(の例)

acetylene(*), benzene, toluene(*), xylene(*), formic acid(*), acetic acid, benzoic acid, oxalic acid, acetonitrile, benzonitrile, formaldehyde, phenol, anisole(*), aniline

また、IUPAC で認められた慣用名であっても、置換命名法の体系で使用して母体とすることが認められないもの(*)もある。詳細は、IUPAC ガイドに定められているものを参照する必要がある。

acetylene × methylacetylene, × bromoacetylene (置換不可)

benzene bromo-benzene, × benzene-yl (C_6H_5 - は phenyl となる)

toluene 2-bromo-toluene, × -bromo-toluene

(以前は、環上のみ置換基が許されていたが、2013 勧告により、置換を許さなくなった。)

m-xylene × 2-bromo-*m*-xylene (置換不可)

IUPAC では認めていない名称でも、一部慣例的に使用されているものもある。

例えば、-bromo-toluene は IUPAC では認められない名称であるが、メチル基上が臭素化された構造、 $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{Br}$ を指す。また、 $\text{CH}_2=\text{CH}_2$ (IUPAC 名 ethene) は、慣例的にエチレン ethylene と記されることがあるが、IUPAC ガイド(1993)では、ethylene は、 $\text{CH}_2=\text{CH}_2$ の構造の慣用名としては認められておらず、二価基 $-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$ (IUPAC 名 ethane-1,2-diyl) の慣用名としてのみ認められている。従って、 $\text{CH}_2=\text{CH}_2$ を ethylene と表記することも、その2つの水素が臭素で置換された $\text{CHBr}=\text{CHBr}$ を dibromo-ethylene と表記することも、IUPAC ガイド(1993)では認めていない。とはいえ、この dibromo-ethylene という物質名は、 $\text{CHBr}=\text{CHBr}$ (dibromo-ethene) を指すと思われる。(di)bromo- が置換を表す接頭語の形であることから、置換命名法に則して命名されていると判断できるためである。

なお、bromo-benzene は臭化ベンゼンと訳すことができるのに対し、dibromo-ethylene を二臭化エチレンと訳してはいけない。二臭化エチレンの名称中のエチレンは、二価基 $-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$ であり、 $\text{CH}_2\text{Br}-\text{CH}_2\text{Br}$ の基官能命名法による正しい物質名 ethylene dibromide(置換命名法では dibromo-ethane) の訳であるからである。このような曖昧さを避けるためには、訳すときに英語表記をそのまま適切な規則に従ってカタカナに置き換え、プロモベンゼン、ジプロモエチレン(または、IUPAC で認められた、ジプロモエテン)、エチレンジプロミドなどとすればよい。

[官能種類命名法 (functional class nomenclature)] :

[基官能命名法 (radicofunctional nomenclature)] :

置換基の名称と官能基の種類名 (class name, 一般名) を連結する。物質名が複数の単語からなることがある。IUPAC1993 以前は、基官能命名法の名称であったが、1993 年勧告より上位の概念としての官能種類命名法と呼ばれる。

2013 勧告により、優先 IUPAC 名として使用できる官能基の種類名が、酸、エステル、酸ハロゲン化物、酸無水物、アミン、オキシド等に制限された。それまで認められていた halide, alcohol, ketone, ether, sulfide, sulfoxide, sulfone などについては、一般 IUPAC 名としては認められるが、優先 IUPAC 名としては認められないこととなった。

左は置換命名法 (一般的には書かないハイフンを書き加えている)、右は官能種類命名法。

halo-alkene	alkyl halide (ハロゲン化アルキル)
alkan-ol	alkyl alcohol
alkyl-oxy-alkane	alkyl alkyl ether
alkan-one	alkyl alkyl ketone
alkan-amine	alkylamine (アルキル基名と「アミン」の間にスペースを空けない。 そのため、厳密には、置換命名法の変形として捉えられる。)

は、2013 勧告により、PIN としては認められないもの。GIN としてのみ認められる。

例 $\text{CH}_3\text{-I}$ iodomethane, methyl iodide

例 *tert*- $\text{C}_4\text{H}_9\text{OH}$ 2-methylpropan-2-ol, *tert*-butyl alcohol

例 $\text{CH}_3\text{-O-CH}_3$ methoxymethane, dimethyl ether

例 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{-O-CH}_3$ methoxyethane, ethyl methyl ether

例 Ph-O-CH_3 methoxybenzene, methyl phenyl ether

例 $\text{CH}_3\text{-S-CH}_3$ (methylsulfanyl)methane, dimethyl sulfide

例 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{-S-CH}_3$ (methylsulfanyl)ethane, ethyl methyl sulfide

例 Ph-S-CH_3 (methylsulfanyl)benzene, methyl phenyl sulfide

例 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NH}_2$ ethanamine, ethylamine

例 PhNH_2 benzenamine, phenylamine, 慣用名 aniline

例 PhCH_2NH_2 1-phenylmethanamine, benzylamine

例 $\text{BrC}_6\text{H}_4\text{CH}_2\text{NH}_2$ 1-(4-bromophenyl)methanamine, × 4-bromobenzylamine

例 Et_2NH (*N*-ethylamino)ethane, diethylamine

例 Me_3N (*N,N*-dimethylamino)methane, trimethylamine

例 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{N(Me)Et}$ *N*-ethyl-*N*-methylbutanamine, *N*-butyl-*N*-ethyl-*N*-methylamine,

環集合：同一の環状化合物が 2 個直接結合しているとき、相当する基名の前に接頭語 bi- (ビ) をつける。単結合でつながっているときには化合物名の前に接頭語 bi- をつけてもよい。位置番号を示すときには一方の環の位置番号にプライム (') をつける。例：4,4'-dibromo-1,1'-biphenyl

[付加命名法 (Additive nomenclature)] : 母体化合物に他の原子が付加したことを表す命名法

例：tetrahydrofuran, styrene oxide など

[減去命名法 (Subtractive nomenclature)] : 母体化合物から特定の原子あるいは原子団が取り除かれたことを表す命名法

例：リボースの 2 位の水酸基が取れたもの 2-deoxy-D-ribose など

[接合命名法] 省略

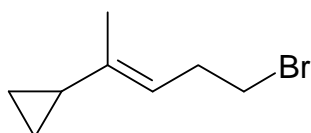
[代置命名法] 2013 勧告により、ヘテロ原子 (団) 数が 4 つ以上のものに限定される。詳細省略

[置換命名法]

2013 勧告により、優先順位則について、以下のように変更された。

- ・ 構成する炭素数と無関係に、環が鎖に優先する。
- ・ 炭素鎖の長さが、不飽和結合の存在に優先する。(重要な変更)

1. **主基 (一番優先される官能基)** を決める。これが名前の接尾語の部分を決める。
2. **主鎖 (母体の炭化水素)** を見つける。このとき、単純なアルカンでは連続した最も長い炭素鎖を見つめる (次の (1) と (2) に該当する部分がない) のであるが、一般的には次の順に決める。
 - (1) **(主基数)** 主基が最大の鎖を第1優先とする。
 - (2) **(環 > 鎖)** 環の構造があれば、炭素鎖に優先する。(2013 勧告により追加。以前は炭素数で多いものを優先した。)
 - (3) **(鎖の長さ: 炭素数)** 上でひとつに決まらない場合、連続した炭素鎖の長さが長いものを選ぶ。
 - (4) **(多重結合数)** 上でひとつに決まらない場合、多重結合 (二重結合と三重結合を区別しない) の数が最大になるものを選ぶ。(2013 勧告以前は、多重結合が炭素鎖の長さに優先した。)
 - (5) **(二重結合の数 > 三重結合)** 上でひとつに決まらない場合、二重結合の数が多いいものを選ぶ。
 - (6) **(主基の位置)** 上でひとつに決まらない場合、主基の位置番号が最小となるような炭素鎖を選ぶ。
 - (7) **(多重結合の位置)** 上でひとつに決まらない場合、多重結合の位置番号が、組として最小 (はじめに出てくる番号が最小、同じ場合には次にでてくる番号がより小さい、...) となる鎖を選ぶ。
 - (8) **(側鎖の数)** 上でひとつに決まらない場合、接頭辞で表される置換基の数 (アルキル基の場合には、母体上の分岐点。ハロゲンなども含めて、側鎖の置換基の数) が最大の鎖を選ぶ。
 - (9) **(側鎖の位置)** 上でひとつに決まらない場合、接頭辞で表される置換基の位置番号が、組として最小 (はじめに出てくる数字が最小、同じ場合には次にでてくる番号がより小さい、以下同じように) となる鎖を選ぶ。
 - (10) **(小さい側鎖の炭素原子数)** 上でひとつに決まらない場合、側鎖の炭素原子数を小さい方から比べ、差が見つかったところの側鎖の炭素原子数が大きいものを選ぶ。
 - (11) 上でひとつに決まらない場合、側鎖の分岐が最小のものを選ぶ。



(例) 環 > 鎖 の規則導入前の名称 (GIN として許容)

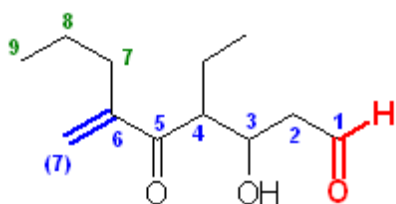
5-bromo-2-cyclopropylpent-2-ene

環 > 鎖 の規則導入による名称

(4-bromo-1-methylbut-1-enyl)cyclopropane または、

(5-bromopenten-2-yl)cyclopropane

後者は、1993 勧告により導入されたアルカンイル基を用いている。



◎ 4-ethyl-3-hydroxy-6-methylene-5-oxononanal

× 4-ethyl-3-hydroxy-5-oxo-6-propylhept-6-enal

2013 勧告前の規則では、多重結合が炭素鎖に優先した。

2013 勧告によれば後者の命名は GIN としても許容されない。

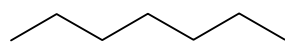
3. **位置番号をつける。** シクロアルカンを除いて末端炭素を必ず 1 番にする。位置番号をつける規則は、主鎖選択の規則と基本的に同じ。なお、多環系や複素環、天然物等については別に定められた番号系を用いる場合がある。

- (1) (主基の位置) 末端に一番近い主基の番号が一番若くなるように番号をつける。
- (2) (多重結合の位置番号) 上で決まらない場合、末端に一番近い多重結合(二重結合と三重結合を区別しない)の番号が一番若くなるように番号をつける。(一番近いものが同じ場合は、二番目、以下同様。ただし最後まで比較しても、二重結合と三重結合に同じ番号がつくときには、はじめの二重結合の方に小さい番号をあてる。)
- (3) (置換基の位置番号の組) 上で決まらない場合、置換基の位置番号の組がもっとも小さくなるようにする。
- (4) (置換基の名称) 上で決まらない場合、最もアルファベット順に先の(命名上はじめに記述される)置換基の番号が小さくなるようにする。
- (5) (例外) 環状炭化水素で、主基を含めて官能基や置換基が一つしかない場合には、位置番号をつける必要はない。

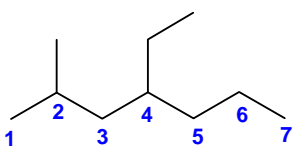
4. 置換基ごとに位置番号をつけたものをアルファベット順にならべ、**1つの化合物名として命名**する。

- (1) (多重結合の位置番号) 連続した2つの位置番号に跨るものはそのうちの若い方をつける。(連続していない番号を持つ2つの炭素間の多重結合の場合は、2つめの番号をカッコ内に添える。)
- (2) (複合官能基) は、主鎖に結合している炭素の位置番号を1として同様の手順でその複合基を命名し、カッコでくくる。
- (3) (倍数接頭語) 2つ以上の同一置換基がある場合は、倍数接頭語を添える(di, tri ...)。ただし、複合官能基名に対しては、bis, tris ...
- (4) (アルファベット順) 倍数接頭語や、ハイフンで区切られる sec- などの記号を除いた置換基名のアルファベット順に並べる。ただし複合官能基内に組み込まれてしまっていて、その置換基自体の数を表すものではないような倍数接頭辞(上(2)のルールによりカッコ内にくくられているもの)は、官能基名の一部として数える。
- (5) (ハイフン) 数字と単語の間はハイフンでつなく。置換基と主鎖の間などはハイフンとしない。(例: x 2-methyl-pentane) ただし、行末でひとつの単語を改行して示す場合は、命名法とは別に(1つの単語であることを示すための)ハイフンを行末に示す。
- (6) (主鎖名の末尾の e) 対応する炭化水素を alkane、二重結合、三重結合を含む場合は alka-en-yne (ハイフンの位置には多重結合の位置番号と必要であれば倍数接頭語)とし、その後ろに主基名を書く。ただし、母音から始まる主基名の場合は、主鎖名の末尾の e は脱落する。また、必要な場合は、主基名の直前にその位置番号や倍数接頭語を示す。数字やハイフンは、その前後の母音子音判断に影響を与えないが、倍数接頭語により子音となった場合は、主鎖名の末尾の e は脱落しない。例: alkan-ol alkane-diol

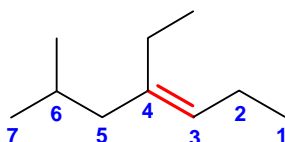
(命名の例) 赤は主官能基。位置番号の付け方にも注意。側鎖置換基はアルファベット順に記す。



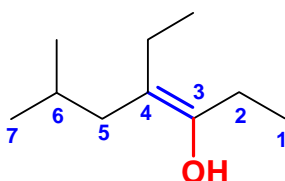
heptane



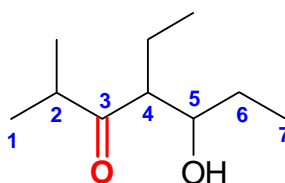
4-ethyl-2-methylheptane



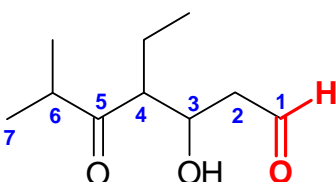
4-ethyl-6-methylhept-3-ene



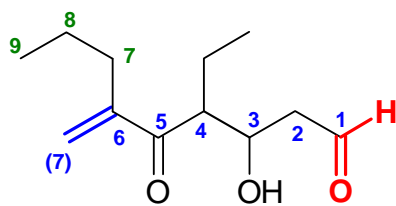
4-ethyl-6-methylhept-3-en-3-ol



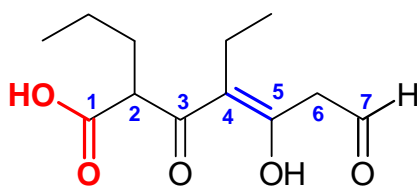
4-ethyl-5-hydroxy-2-methylheptan-3-one



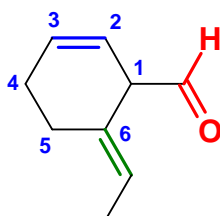
4-ethyl-3-hydroxy-6-methyl-5-oxoheptanal
(末端にしか来ない官能基なので、-1-al とはしない。)



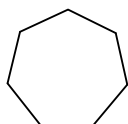
4-ethyl-3-hydroxy-6-methylene-5-oxononanal
× 4-ethyl-3-hydroxy-5-oxo-6-propylhept-6-enal
2013 勧告前の規則では、多重結合が炭素鎖に優先した。
2013 勧告によれば後者の命名は GIN としても許容されない。



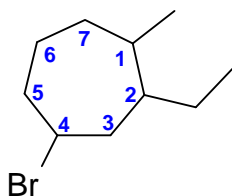
4-ethyl-5-hydroxy-3,7-dioxo-2-propylhept-4-enoic acid
(-1-oic acid とはしない。)



6-ethylidenecyclohex-2-enecarbaldehyde
(主官能基 -CHO の炭素が 1 位にならない例。なお、主官能基名が子音からなので、直前の e が落ちない。)



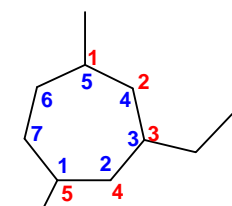
cycloheptane



Br

4-bromo-2-ethyl-1-methylcycloheptane

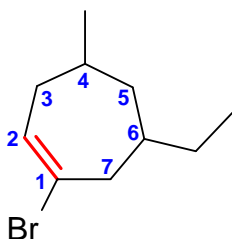
(主官能基(接尾語として命名される官能基)も多重結合もないので、位置番号は、側鎖の種類(や名称)に関係なく置換基の位置の数字の組が小さくなるように選ぶ。)



Br

1-bromo-3-ethyl-5-methylcycloheptane

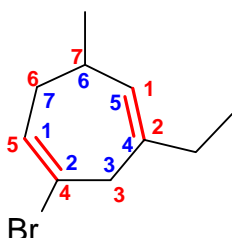
(置換基の位置だけでは、数字の組が同じになり、決められない場合は、小さい数字にアルファベット順で先の側鎖を割り当てる。このため、赤のナンバリングは間違いである。)



Br

1-bromo-6-ethyl-4-methylcycloheptene

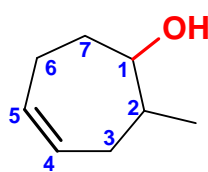
(主官能基はないが、多重結合があるので、多重結合の位置番号がもっとも小さくなるようにする。実際には、別に主官能基を持たないシクロアルケンの場合、二重結合炭素が1位と2位になる。その上で、側鎖番号の組が小さくなるように定める。なお、命名上、cycloalk-1-eneの1は省略される。)



Br

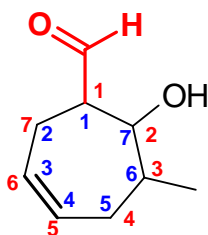
2-bromo-4-ethyl-6-methylcyclohepta-1,4-diene

(主官能基を持たないので、多重結合の位置番号の組が小さくなるようにする。つまり、側鎖の位置に関係なく、cyclohepta-1,5-dieneではなく、cyclohepta-1,4-dieneとする。この時点で赤と青の2通りが考えられるが、側鎖番号の組が小さくなる方の回りを選ぶ。そのため、赤のナンバリング(2,4,7)ではなく、青のナンバリング(2,4,6)になる。)



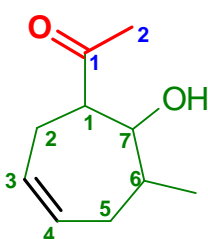
2-methylcyclohept-4-en-1-ol

(環に直結した主官能基の位置番号を1とする。主官能基は、水酸基。主官能基が複数ある場合は番号の組が小さくなるように選ぶ。ついで、多重結合の番号の組が小さくなるように選ぶ。それでもまだ決められない場合は、側鎖の番号(の組)が小さくなるように選ぶ。更に選ぶ場合は若い番号にアルファベット順の先にくるものを選ぶことになる。)



7-hydroxy-6-methylcyclohept-3-enal

(主官能基はホルミル基。これ以外の側鎖は、水酸基もアルキル基もアルファベット順以外は同列に扱うことになる。左の例では、多重結合の番号(の組)が小さくなるように決める方が、側鎖の位置番号に優先するので、赤のナンバリングは間違い。)



1-(7-hydroxy-6-methylcyclohept-3-enyl)ethan-1-one

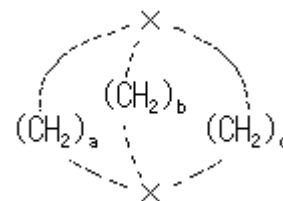
(主官能基はケトンのカルボニル基。エタノンの側鎖を複合官能基として命名する。側鎖(複合官能基)の命名では、シクロヘプチル基の -yl がこの部分における最優先の官能基扱である。従ってシクロヘプタン環の位置番号は、結合位置(-yl)が1で、左の緑数字のようになる。)

多環系化合物、スピロ化合物の命名

二環系化合物の命名は以下のように考える。

1) 2つの橋頭炭素(右図、X印の炭素)の間にある炭素の数を、3本の橋について数える。この数を**大きい順**にならべたものが "[a.b.c]" の部分である。「ビシクロ」と、「全体の炭素数と同じアルカンの名称」の間にこれらの数字をはさむ。(なお、a、b、cの「橋の長さ」に橋頭炭素を含まないから、全体の炭素数は、 $a + b + c + 2$ となっている。)

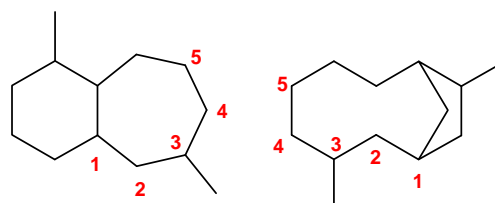
(数字と数字の間は、コンマではなく、ピリオドであることに注意。)



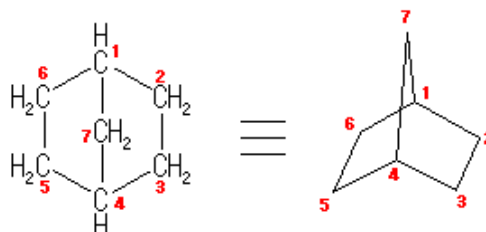
2) 番号の付け方は、2つの橋頭炭素のうち的一方を1とし、次の一筆書きの順に炭素に番号を振る。すなわち、一番長い橋を渡り反対側の橋頭炭素にいく。次に長い橋を渡りはじめの橋頭炭素に来たのち、最後の一番短い橋を渡る。

左 : 3,8-dimethylbicyclo[5.4.0]undecane

右 : 3,9-dimethylbicyclo[6.2.1]undecane



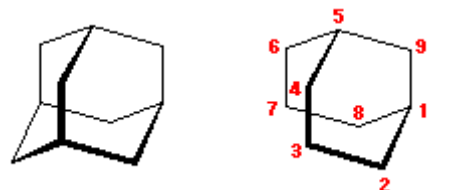
norbornane は、bicyclo 化合物の体系的命名法の下では、bicyclo[2.2.1]heptane となる。(参照、4.48 発展)



1) この化合物の骨格は、3箇所¹に切れ目をいれることにより、完全に環構造をなくすことができるので、「三環式炭化水素、tricycloalkane」である。

2) 「一番短い橋」を取り除いた、二環式炭化水素である左の化合物は、上述のルールにより、bicyclo[3.3.1]nonane と命名される。

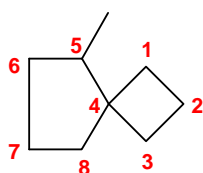
一方の橋頭(C1)から一番長い橋(C2, C3, C4)を通ってもう一つの橋頭(C5)に達し、次に長い橋(同じ長さ : C6, C7, C8)を渡り、最後に3本目の橋(C9)を渡る。橋の長さは、[3.3.1]、全炭素数は9で、同じ炭素数のアルカンは、nonane である。



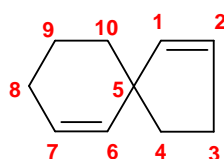
3) bicyclo[3.3.1]nonane の、**3位、7位を、炭素数1の橋**で結んだものがもとの三環式炭化水素であるから、これは、tricyclo[3.3.1.1^{3,7}]decane という命名となる。

4) この化合物の慣用名は、「adamantane、アダマンタン」である。

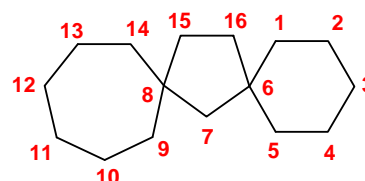
2つの環構造が1つの原子だけを共有している場合、この結合を自由スピロ結合という。また、この2環による共有原子をスピロ原子という。分子内にスピロ原子がひとつあるものを monospiro、二つあるものを dispiro の化合物などという。二つの脂環式環の monospiro 化合物は、炭素数が同数の非環式炭化水素の名称に spiro- をつけて表す。spiro 原子の隣を1位とし、(端の環で) **小さい方から順に**回って番号をつけ、spiro 原子をつなぐ橋の長さの数字をピリオドで区切り[] で囲んで示す。



5-methylspiro[3.4]octane



spiro[4.5]deca-1,6-diene



dispiro[5.1.6.2]hexadecane