

有機物質化学

有機化合物の命名法

有機化合物の命名法

IUPAC命名法の基本構成:

立体化学

接頭語
(数+置換基)

語幹
(主鎖:炭素数)

接尾語
(数+官能基)

化合物の主鎖*(主骨格)を“語幹”+“接尾語”で表現する。

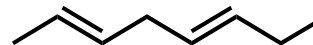
* 主鎖は、最も炭素鎖が長い部分。主鎖から枝分かれした部分(側鎖)は置換基となる。

炭素数	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
語幹	meth	eth	prop	but	pent	hex	hept	oct	non	dec

alkane (飽和脂肪族): 語幹 + **ane**

alkene (C=C): 語幹 + **ene**

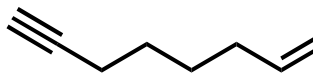
複数のC=Cを含む場合は、**a+その数+ene**で表し、その位置番号を付加する。位置番号は、その総和が最も小さくなるようにする。



- octa-2,5-diene
- × octa-3,6-diene

alkyne (C≡C): 語幹 + **yne**

複数のC≡Cを含む場合は、**a+その数+yne**で表し、その位置番号を付加する。位置番号は、その総和が最も小さくなるようにする。



- oct-1-ene-7-yne
- × oct-7-ene-1-yne

C=CおよびC≡Cが混合する場合はene+yneで表し、C=Cの位置番号が小さくなるように位置番号を割り振る。

表1. 数の表現 (捕捉 2 参照)

数	表示	数	表示
1	mono	4	tetra
2	di	5	penta
3	tri	6	hexa

表2. 倍数の表現* (捕捉 2 参照)

倍数	表示	倍数	表示
2	bis	4	tetrakis
3	tris	5	pentakis

* 数表現を用いる同じ置換基が複数ある場合に主に利用する。

- 利用例
- bis(trifluoromethyl)
 - × bis(methyl)

有機化合物の命名法(1-1)

○官能基と置換基の命名（置換命名法（S命名法））

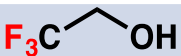

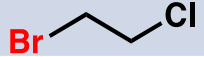
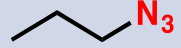
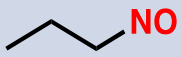
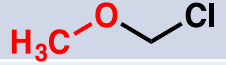
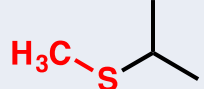
官能基：主鎖の性質を表すもの（主基）（優先順位が最も高いもの）

置換基：側鎖、官能基以外の置換基を表すもの

種類	化学式	官能基（接尾語）	置換基（接頭語）	優先順位
alkane	-	語幹 + ane	語幹 + yl or anyl （捕捉 1 参照）	
alkene	-	語幹 + ene	語幹 + enyl	
alkyne	-	語幹 + yne	語幹 + ynyl	
imine	=NH	語幹 + an + imine	imino + 語幹 + 官能基	
amine	-NH ₂	語幹 + an + amine	amino + 語幹 + 官能基	
thiol	-SH	語幹 + an + thiol	sulfanyl + 語幹 + 官能基	
alcohol/phenol	-OH	語幹 + an + ol	hydroxy + 語幹 + 官能基	
ketone	-(C=O)-	語幹 + an + one	oxo + 語幹 + 官能基	
nitrile	-C≡N	語幹 + ane + nitrile	cyano + 語幹 + 官能基	
aldehyde	-CHO	語幹 + an + al	formyl + 語幹 + 官能基	
amide	-CONH ₂	語幹 + an + amide	carbamoyl + 語幹 + 官能基	
acyl halide	-COX	語幹 + an + oyl halide	haloformyl + 語幹 + 官能基	
ester	-COOR	R 語幹 + an + oate	Rの語幹 + oxycarbonyl + 語幹 + 官能基	
carboxylic acid	-COOH	語幹 + an + oic acid	carboxy + 語幹 + 官能基	

有機化合物の命名法(1-2)

置換基（接頭辞）のみとして取り扱うもの

種類	化学式	置換基		例
fluoride	-F	fluoro + 語幹 + 官能基		2,2,2-tri fluoro ethan-1-ol
chloride	-Cl	chloro + 語幹 + 官能基		1- chloro butane
bromide	-Br	bromo + 語幹 + 官能基		1- bromo -2-chloroethane
iodide	-I	iodo + 語幹 + 官能基	$\text{H}_3\text{C}-\text{I}$	iodo methane
azide	$-\text{N}_3$	azido + 語幹 + 官能基		1- azide propane
diazo	$=\text{N}_2$	diazo + 語幹 + 官能基	$\text{H}_2\text{C}=\text{N}_2$	diazo methane
nitorosyl	$-\text{NO}$	nitroso + 語幹 + 官能基		1- nitroso propane
nitro	$-\text{NO}_2$	nitro + 語幹 + 官能基	$\text{H}_3\text{C}-\text{NO}_2$	nitro methane
alkoxy	$-\text{OR}$	Rの語幹 + oxy + 語幹 + 官能基		chloro(meth oxy)methane
thioalkoxy	$-\text{SR}$	Rの語幹 + yl + thio + 語幹 + 官能基		2-methyl thio propane

有機化合物の命名法(1-3)

○置換命名法 (S命名法) の構成 (IUPAC準拠)

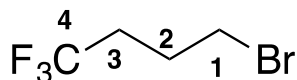
1) 主鎖の決定法

- a: 主基 (優先順位の最も高い官能基) を最も多く含む鎖
- b: 不飽和結合 (多重結合) を最も多く含む鎖
- c: 骨格炭素原子数が最も多くなる鎖
- d: 二重結合が最多の鎖
- e: 主基あるいは不飽和結合の位置番号が最も小さくなる鎖
- f: 接頭辞 (置換基) の数が最多で位置番号が小さくなる鎖

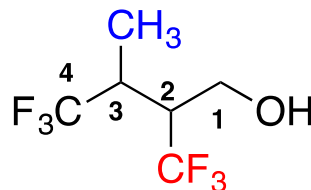
2) 補足

- a: 接頭辞の順番は、置換基名のアルファベット順で記述する。
なお、di, triなどの数を示す表記は飛ばして考える。
- b: 最初に記述する置換基の数が多いようにする。
- c: 最初に記述する置換基の位置番号は、総和が最小になるようにする。

例

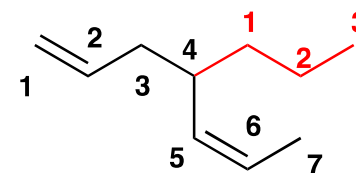


4-bromo-1,1,1-trifluorobutane

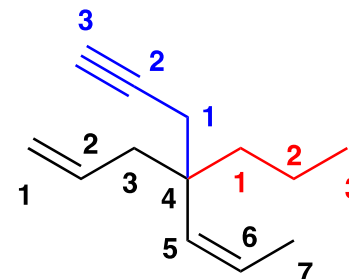


4,4,4-trifluoro-3-methyl-
2-(trifluoromethyl)butan-1-ol

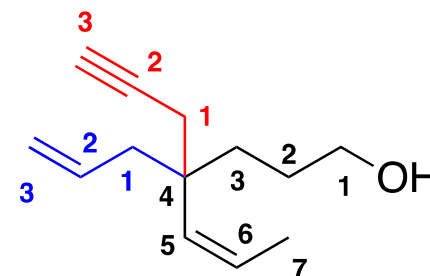
注意: 括弧内の数詞は無視しない



4-propylhepta-1,5-diene



優先順位: $-C=C->-C\equiv C->-C-C-$
4-(prop-2-yn-1-yl)-4-propyl
hepta-1,5-diene



優先順位: $-OH > -C=C->-C\equiv C-$
4-(prop-2-en-1-yl)-4-(prop-2-yn-1-yl)
hept-5-en-1-ol

有機化合物の命名法(2-1)

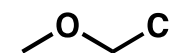
○基官能命名法 (R命名法)

S命名法と異なり、主基を示す接尾語を用いず、官能基種名を表す。

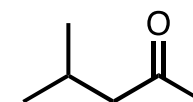
構成：置換基＋官能基（主基）

置換基が複数存在する場合は、アルファベット順に並べる。

種類	化学式	命名	優先順位
azide	-N ₃	置換基＋azide	 <p>低</p> <p>高</p>
iodide	-I	置換基＋iodide	
bromide	-Br	置換基＋bromide	
chloride	-Cl	置換基＋chloride	
fluoride	-F	置換基＋fluoride	
sulfide	R ¹ -S-R ²	置換基(R ¹)＋置換基(R ²)＋sulfide	
ether	R ¹ -O-R ²	置換基(R ¹)＋置換基(R ²)＋ether	
thiol	-SH	置換基＋hydrosulfide	
alcohol	-OH	置換基＋alcohol	
thioketone	R ¹ -(C=S)-R ²	置換基(R ¹)＋置換基(R ²)＋thioketone	
ketone	R ¹ -(C=O)-R ²	置換基(R ¹)＋置換基(R ²)＋ketone	
isonitrile	-N≡C	置換基＋isonitrile	
nitrile	-C≡N	置換基＋nitrile	



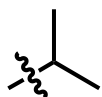
[S命名法]
chloro(methoxy)methane
[R命名法]
Chloromethyl methyl ether



[S命名法]
4-methylpentan-2-one
[R命名法]
methyl 2-methylpropyl ketone

有機化合物の命名法(2-2)

○慣用名 (古くからの呼び方)
主な例



[S命名法]

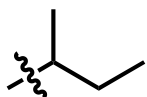
2-propyl

[R命名法]

1-methylethyl

[慣用名]

isopropyl



[S命名法]

2-butyl

[R命名法]

1-methylpropyl

[慣用名]

sec-butyl

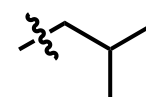


[S/R命名法]

1,1-dimethylethyl

[慣用名]

tert-butyl

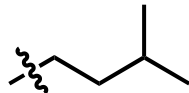


[S/R命名法]

2-methylpropyl

[慣用名]

isobutyl

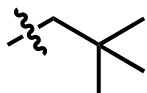


[S/R命名法]

3-methylbutyl

[慣用名]

isopentyl

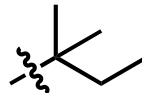


[S/R命名法]

2,2-dimethylpropyl

[慣用名]

neopentyl



[S/R命名法]

1,1-dimethylpropyl

[慣用名]

tert-pentyl

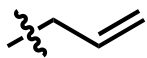


[S/R命名法]

ethenyl

[慣用名]

vinyl

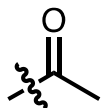


[S/R命名法]

2-propenyl

[慣用名]

allyl

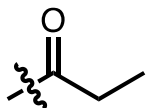


[S/R命名法]

ethanoyl

[慣用名]

acetyl

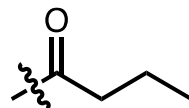


[S/R命名法]

propanoyl

[慣用名]

propionyl

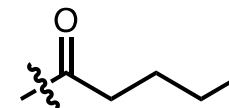


[S/R命名法]

butanoyl

[慣用名]

butyryl

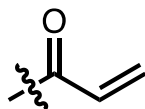


[S/R命名法]

pentanoyl

[慣用名]

valeryl

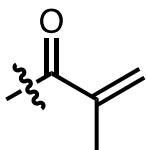


[S/R命名法]

propenoic

[慣用名]

acryloyl

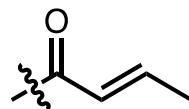


[S/R命名法]

2-methylpropenoic

[慣用名]

methacryloyl



[S/R命名法]

trans-but-2-enoyl

[慣用名]

trans-crotonyl

有機化合物の命名法(3-1)

○環式化合物の命名法

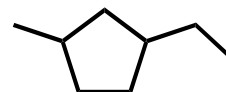
- ・ 接頭語として **cyclo** をつける。 **cyclo** + 語幹
- ・ 不飽和結合や置換基が一つしかない場合には、位置番号をつける必要はない。



methylcyclopropane



3-methylcyclobutene

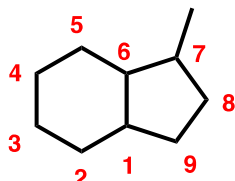


1-ethyl-3-methylcyclopentane

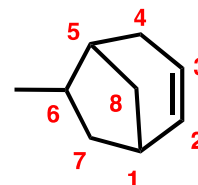
・ 多環式化合物

a: 二環式化合物

- 1) 接頭語として **bicyclo** をつける。 **bicyclo**+[x.y.z]+語幹
- 2) 2 個の橋頭炭素を結ぶ三つの橋の炭素数を角かっこに入れて示す。
- 3) 位置番号は橋頭のの一つから始め、長い橋から順番に番号をつける。



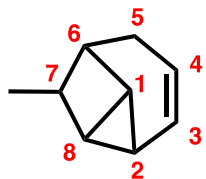
7-methylbicyclo[4.3.0]nonane



6-methylbicyclo[3.2.1]oct-2-ene

b: 三環式化合物

- 1) 接頭語として **tricyclo** をつける。 **tricyclo**+[w.x.y.z^{a,b}]+語幹
- 2) 多くの炭素が含まれるように二環を選び、二環式と同じように位置番号を付ける。
- 3) もう一つの橋架けの炭素数、および位置番号を上付きしめす。

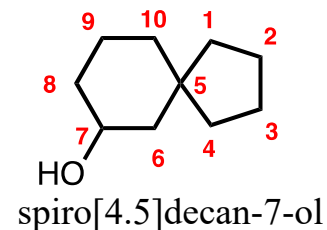


7-methyltricyclo[4.2.0.0^{2,8}]oct-3-ene

有機化合物の命名法(3-2)

c: スピロ環式化合物（1つの炭素で二つの環が繋がった化合物）

- 1) 接頭語として **spiro** をつける。 **spiro**+ $[x.y]$ +語幹
- 2) 位置番号はスピロ原子の隣から始め、小さい環の方から先につける。

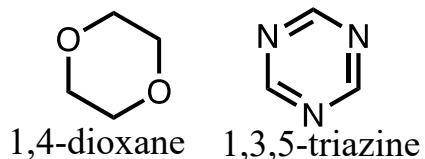
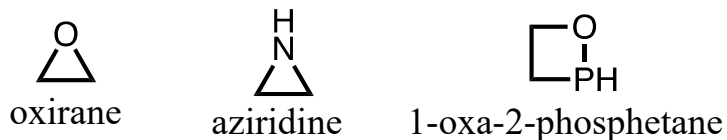


d: ヘテロ環化合物（複素環化合物）

環を構成しているヘテロ元素を表す接頭語、および環の大きさを表す語幹で表現する。

表1. ヘテロ元素を示す接頭語

元素	表示	元素	表示
O	oxa	S	thia
N	aza	P	phospha



ヘテロ環化合物には、多くのものに慣用名の利用が認められている。

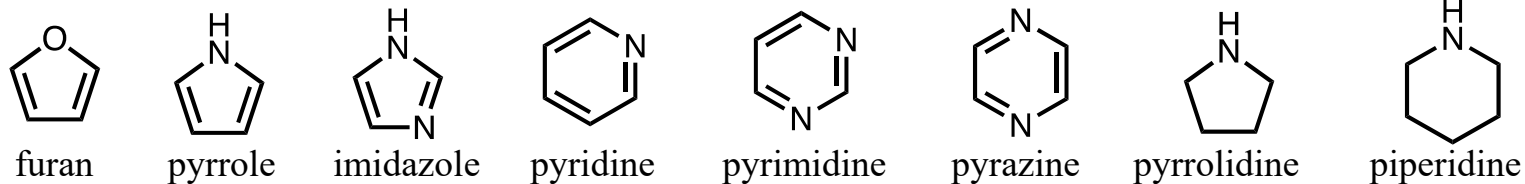


表2. 環の大きさを示す語幹

環員数	表示		環員数	表示	
	不飽和	飽和		不飽和	飽和
3*	irene	irane	5	ole	olane
4	ete	etane	6	ine	ane

* Nだけを含む三員環はirineを利用することも可

ヘテロ環化合物の命名法

ヘテロ環化合物（複素環化合物）

環を構成しているヘテロ元素を表す接頭語をつけ、環状アルカンの命名を行う。

表1. ヘテロ元素を示す接頭語

元素	表示	元素	表示
O	oxa	S	thia
N	aza	P	phospha



oxacyclopropane
(**oxirane**)



oxacyclopropene
(**oxirene**)



azacyclopropane
(**azirane, aziridine**)



azacycloprop-2-ene
(**1H-azirene, 1H-azirine**)



thiacyclopropane
(**thiirane**)



thiacyclopropene
(**thiirene**)

表2. 環の大きさを示す語幹

環員数	表示		環員数	表示	
	不飽和	飽和		不飽和	飽和
3*	irene	irane	5	ole	olane
4	ete	etane	6	ine	ane

*Nだけを含む三員環はirine(不飽和), iridine(飽和),
四員環はetine(不飽和), etidine(飽和)を利用することも可



oxacyclobutane
(**oxetane**)



azacyclobutane
(**azetane, 2-azetidene**)



thiacyclobutane
(**thetane**)



oxacyclobutene
(**2H-oxete**)

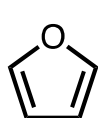


Azacyclobut-2-ene
(**2H-azete, 2-azetine**)

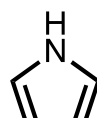


thiacyclobut-2-ene
(**2H-thete**)

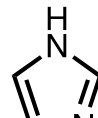
ヘテロ環化合物には、多くのものに慣用名の利用が認められている。



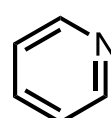
furan



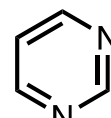
pyrrole



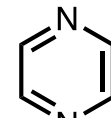
imidazole



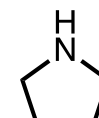
pyridine



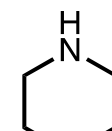
pyrimidine



pyrazine



pyrrolidine



piperidine

アミンの命名法

・有機化合物の命名法

IUPAC命名法の基本構成：

立体化学	接頭語 (数+置換基)	語幹 (主鎖：炭素数)	接尾語 (数+官能基)
------	----------------	----------------	----------------

化合物の主鎖* (主骨格) を “語幹” + “接尾語” で表現する。

*主鎖は、最も炭素鎖が長い部分。主鎖から枝分かれした部分 (側鎖) は置換基となる。

炭素数	1	2	3	4	5	6	7	8	9
語幹	methane	ethane	propane	butane	pentane	hexane	heptane	octane	nonane

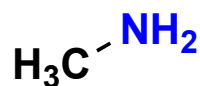
alkane (飽和脂肪族)：語幹 + **ane**

アミノの場合

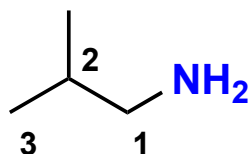
種類	化学式	官能基 (接尾語)	置換基 (接頭語)
amine	-NH ₂	語幹 + an + amine	amino + 語幹 + 官能基

表1. 数の表現

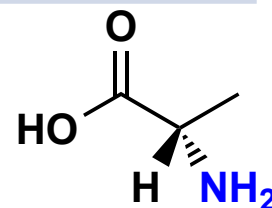
数	表示	数	表示
1	mono	4	tetra
2	di	5	penta
3	tri	6	hexa



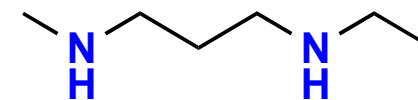
methan**amine**



2-methylpropan**amine**



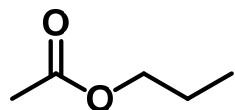
(*S*)-2-**amino**propanoic acid



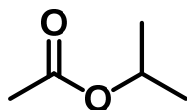
*N*¹-ethyl-*N*³-methyl-1,3-propan**ediamine**

捕捉1

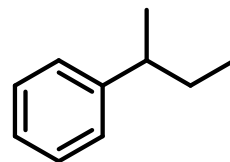
- アルキル置換基（直鎖：語幹+yl、枝分かれ：語幹+anyl）



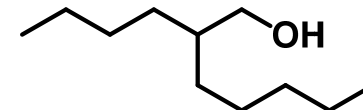
prop-1-yl ethanoate



propan-2-yl ethanoate



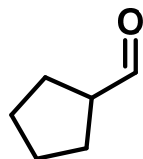
butan-2-ylbenzene



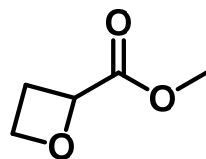
2-(but-1-yl)heptan-1-ol

- 環状骨格にカルボニル基が置換した場合

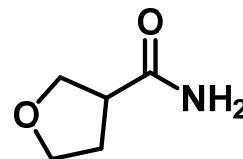
脂肪族



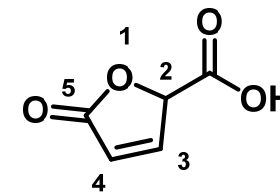
Cyclopentane
carbaldehyde



methyl 1-oxacyclobutane
-2-carboxylate

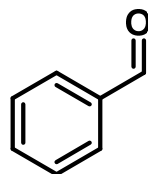


1-oxacyclopentane
-3-carboxamide

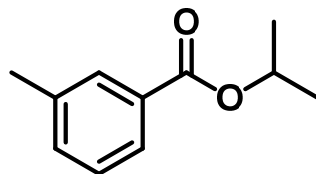


5-oxo-2,5-dihydrofuran
-2-carboxylic acid

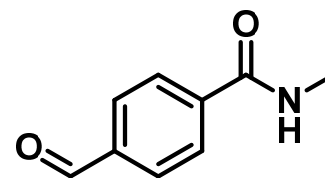
ベンゼン類



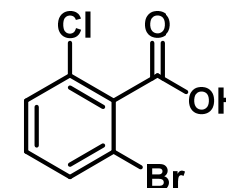
benzaldehyde



2-propanyl 3-methylbenzoate



N-methyl 4-formyl
benzamide

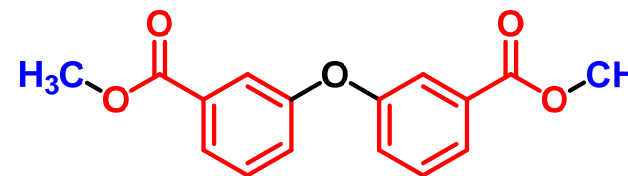
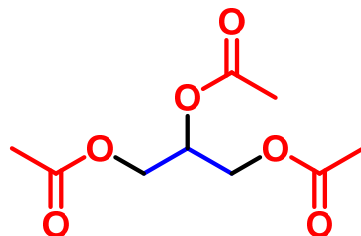
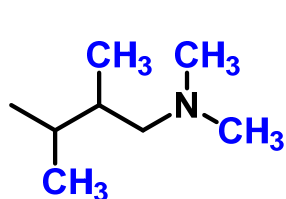


2-bromo-6-chloro
benzoic acid

捕捉2

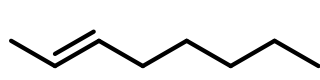
• 数の表現

同じ置換基は位置に関わらずひとまとめで数える。

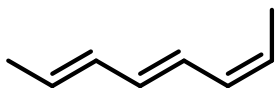


N,N,2,3-tetramethylbutanamine *propane-1,2,3-triyl triacetate* *dimethyl 3,3'-oxydibenzoate*

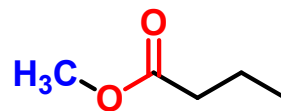
主官能基の数を表す表現の前は母音を入れる



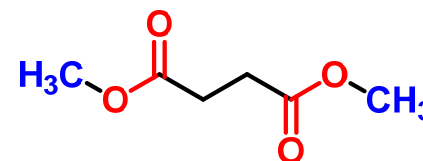
(E)-oct-2-ene



(2Z,4E,6E)-octa-2,4,6-triene



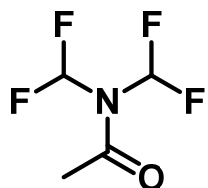
methyl butanoate



dimethyl butane-2,4-dioate

(位置番号が明らかな場合は省略)

括弧でくくる置換基(複合的な置換基)が複数ある場合はbis, trisなどで数を示す。



N,N-bis(difluoromethyl)acetamide